



TITLE:

高精度界面捕捉法の開発と気液混  
相流数値計算への応用(  
Dissertation\_全文)

AUTHOR(S):

藤岡, 奨

---

CITATION:

藤岡, 奨. 高精度界面捕捉法の開発と気液混相流数値計算への応用. 京都大学, 2013, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2013-03-25

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k17508>

RIGHT:

---

# 高精度界面捕捉法の開発と気液混相流数値計算への応用

2013年3月

藤岡 奨



# 目次

<b>第1章 序論</b>	<b>1</b>
参考文献	7
<b>第2章 局所勾配型非数値拡散フィルタの開発</b>	<b>11</b>
2.1 非数値拡散フィルタの理論背景	11
2.1.1 階段関数の移流計算に伴う数値誤差	11
2.1.2 階段関数の移流計算における minmod 関数による勾配制限関数の効果	14
2.1.3 2次元以上の空間における階段関数の移流計算	17
2.2 非数値拡散フィルタのアルゴリズム	20
2.2.1 アルゴリズムの概要	20
2.2.2 フィルタ前処理	21
2.2.3 数値誤差フラックス方向の定義	22
2.2.4 数値誤差フラックス量の計算	25
2.2.5 1次元計算における計算例	27
2.2.6 非数値拡散フィルタの並列化	29
2.3 検証計算	32
2.3.1 1次元波動移流	32
2.3.2 2次元円盤回転	32
2.3.3 2次元切り欠け円盤回転	35
2.3.4 2次元 Single Vortex	37
2.3.5 3次元 Single Vortex	38
2.4 章のまとめ	50
参考文献	50
<b>第3章 界面の平面近似を用いた高精度界面捕捉法</b>	<b>52</b>
3.1 研究の背景	52
3.2 界面捕捉のアルゴリズム	53
3.2.1 概要	53
3.2.2 セル中心における法線ベクトルの評価	54



3.2.3	収束計算を伴う界面形状推定法	54
3.2.4	切断平面の初期推定	56
3.2.5	体積断片の求積	57
3.2.6	移流フラックス評価	59
3.3	計算手法に関する各種検討	61
3.3.1	法線ベクトル評価係数に関する検討	61
3.3.2	切断平面初期値に関する検討	63
3.3.3	移流計算方向の順番に関する検討	64
3.4	検証計算	64
3.4.1	球体回転問題	64
3.4.2	3次元 Single Vortex 問題	65
3.5	章のまとめ	69
	参考文献	70
<b>第4章</b>	<b>界面形状分類に基づく表面張力評価法</b>	<b>76</b>
4.1	研究の背景	76
4.2	表面張力評価基礎式	77
4.3	セル境界における法線ベクトル評価	79
4.4	セル頂点における流体識別子	80
4.5	計算セルタイプ識別	82
4.6	界面基本形状推定および交差線評価	85
4.7	検証計算	90
4.7.1	CSF モデルの適用	90
4.7.2	曲率の再現性の検証	91
4.7.3	ラプラス則再現計算	92
4.8	章のまとめ	93
	参考文献	94
<b>第5章</b>	<b>気液混相流れへの適用</b>	<b>95</b>
5.1	重力が支配的な気液混相流数値計算例	95
5.1.1	水柱崩壊問題	95
5.1.2	様々なスロッシング現象	98
5.2	表面張力が支配的な気液混相流数値計算例	107
5.2.1	2次元せん断流れ中の液滴分裂	107
5.2.2	落下液滴の液面衝突	112

5.2.3	落下液滴の変形 . . . . .	122
5.2.4	上昇気泡の変形 . . . . .	126
5.2.5	連結水槽間の流体交換 . . . . .	129
5.3	章のまとめ . . . . .	130
	参考文献 . . . . .	132
<b>第 6 章</b>	<b>結論</b>	<b>134</b>
	<b>謝辞</b>	<b>137</b>
<b>付 録 A</b>	<b>階段関数の移流計算に伴う数値拡散について</b>	<b>138</b>
	参考文献 . . . . .	141



# 第1章 序論

## 本研究の背景と目的

混相流を対象とした流体運動の数値シミュレーションでは、各相の界面形状を正確に追跡することが重要である。界面形状の追跡手法には、幾何学的に界面形状を表現しその時間変化を追う手法 (界面追跡法) [1, 2] や、界面付近でラグランジュ的に運動する粒子を追跡して界面形状を得る手法 [3]、あるいは Volume of fluid (VOF) 法 [4] や Level set 法 [5–7] のように、流体領域内部で定義される関数を利用して界面形状を追跡する界面捕捉法と呼ばれる手法が存在する。界面追跡法では、界面の大変形に追従するために特殊な処理が必要なこと [8]、界面付近での粒子の運動をラグランジアン的に追跡する手法 [9–11] や Level set 法においては、質量保存等が問題 [6] となっている。

VOF 法においては、計算セル内の液体体積占有率を利用した識別関数を移流させることによって時間変化する気液界面形状を表現する。他の手法と比較して質量保存の問題を生じることは少ないが、計算の時間発展に伴い、識別関数が数値粘性などの影響で拡散すると界面位置の特定が難しくなり、正確な流体運動の予測が困難となる。

本研究では、容器の振動や攪拌等による流体運動あるいは、自由水面が大規模に変形する流体運動などにみられるような、複雑な気液混相流れの数値計算を高精度かつ安定に行う数値解析手法に利用可能な高精度界面捕捉法の開発を目的とする。このような数値計算を行うためには、時間発展する液体領域と気体領域の境界面を高精度に捕捉する必要がある。

界面形状は識別関数の不連続点によって表現されるため、識別関数の移流計算問題を単純化すると階段関数の移流計算に帰着する。したがって、界面捕捉を高精度に行うために本質的には多次元階段関数の高精度移流計算手法の開発が必要である。しかし、階段関数は不連続点を含むため既往の移流スキームによる高精度の移流計算は数値不安定性あるいは数値拡散の問題を生じる。

これらを踏まえ本研究では、識別関数の高精度移流計算手法について以下の通り考察した。

- 既存の移流スキームで識別関数の移流方程式を解いた後に、推定数値誤差の移流計算を行うことによって、数値拡散や離散化に伴う影響で失われた識別関数の不連続性を、元の状態にできるだけ近づけるための非数値拡散フィルタ (Anti-Numerical Diffusion filter, AND フィルタ) を提案した [12].
- 識別関数の移流計算手法として知られる 3 次元 PLIC(Piecewise Linear Interface Calculation, 3DPLIC) のアルゴリズムの改良を行った.

第 2 章にて提案する AND フィルタは主に移流計算に伴う数値拡散を補正するフィルタであり、隣接計算セル点間での推定数値誤差フラックスの移流計算によって拡散した被移流関数を拡散前の状態へ近づける機能を有する.

第 3 章にて検討する 3DPLIC においては、当該計算セル内の界面形状を平面で近似し、近似平面位置とその傾きを与えられた法線ベクトルと体積占有率に整合するように決定する. 本研究では、平面位置の決定アルゴリズムにおいて体積占有率の相対誤差を用いた収束計算を導入し、精度の向上について検討した [13].

これら 2 件の識別関数移流計算の高精度化に伴う検討に基づき、第 4 章では、識別関数の不連続性が良く保たれた状態を前提として表面張力評価法の検討を行った [14].

従来の表面張力評価法として代表的な CSF モデル [15] のように、計算セルに対して数倍程度のスケールを持つ界面領域で表面張力を考慮するのではなく、界面を含む計算セルでのみ表面張力を考慮する手法である. 表面張力評価式としてラプラス式を用いるのではなく、微小界面要素周囲に働く表面張力の合力を界面を含む計算セルに与えるという解法を提案した.

これらの界面捕捉手法の開発は混相流れ数値計算における界面の取り扱いを局所化する方向で取り組まれている. この背景として近年の大型計算機の性能向上がある. 計算機の演算性能の向上とともに大規模流体計算が可能となってきたが、MAC 系解法による流体計算をはじめとして、流体計算の最も高負荷部分は圧力計算に伴う連立一次方程式の求解である. 連立一次方程式の求解に要する計算資源は、計算領域の計算セル数のべき乗に比例するため、いかに大規模計算機が利用可能となり、多数の計算格子が利用可能となったとしても計算の大規模化には限界がある. 大規模計算機の性能を有効に活用してより詳細で精度の高い数値計算を行うためには、気液界面部分に必要とされる計算セル数を可能な限り少なく抑えることも必要である. 界面付近に必要とされる計算セル数は、例えば、サイズを固定した計算領域内部の一滴の水滴の計算を行う場合、界面領域を表現するための計算セル数が多くなれば、計算領域全体としての計算セル数も多くなる. 水滴一滴当たりの流体計算に最低限必要な計算セル数もあるが、気液が激しく混ざり合った流体を

全体として捉えたい場合などには、界面付近に必要とされる計算セルの数が計算領域全体の計算セル数に影響する。

また、界面処理を局所化するもう一つの利点は、異なるスケールの物理現象を一度に解析する素地があることである。大規模計算機を利用することによって、気泡や水滴周りの微視的な流れとそれらが群となって移動する流れの両方のマルチスケール現象を解ける可能性を有している。

## 本論文の構成

本論文は気液混相流場の数値計算法のうち特に界面捕捉法に深く関連する識別関数の高精度移流計算手法について述べる。この上で、界面における力学的境界条件として重要な表面張力評価法について述べ、提案手法の有効性について種々の検証計算を通して確かめる。流体計算には非圧縮性流体の気液混相流場の数値解法である MICS (Multiphase Incompressible flow solver with Collocated grid System) [16] を用いた。界面捕捉法として体積占有率を識別関数として用いる手法について検討した。

本論文では識別関数の高精度移流計算のために二つの異なるアプローチを検討し、それぞれ第 2 章、第 3 章に記述した。

第 2 章では、一次元非圧縮流れ場における非数値拡散フィルタ (Anti-Numerical Diffusion filter, AND フィルタ) の定式化を行った。また多次元場に対して局所勾配を利用した非数値拡散フィルタのアルゴリズム実装方法を提案し、さらに領域分割に基づく並列計算アルゴリズムに発展させた。AND フィルタは識別関数の移流計算を行った際に発生する数値誤差を修正する方法である。離散化した変数による数値解と理論解の整合性に着目して数値誤差を推定し、移流計算に伴う数値誤差を修正する。数値誤差修正量は保存系の移流方程式で記述されるため、理論的には質量は必ず保存される。AND フィルタにおいては、隣接計算セル間で推定数値誤差フラックスを移流させることによって識別関数分布の修正を行う。なお、推定数値誤差フラックスはオーバーシュートやアンダーシュートが発生しないように評価される。局所勾配を利用したアルゴリズムにおいては識別関数の最急勾配方向へ推定数値誤差フラックスを移流させることによって数値拡散による誤差修正を行う。

AND フィルタは数値的に安定であるが数値拡散が大きい移流スキームと組み合わせることによって、数値拡散を抑えながら安定かつ高精度に移流方程式を解くことを目的としている。このように、AND フィルタは移流計算とは完全に切り離されているため、既存の高次移流スキームと併用して利用することが可能であり、汎用性において優れていると考えられる。本論文では、AND フィルタのアルゴリズムについて検討した後、1 次元、2

次元および 3 次元の種々の検証計算を実施し、その適用性について検討した。移流検証計算によって AND フィルタの有効性を検証した後、第 5 章にて 2 次元および 3 次元の気液混相流れに適用し、気液混相流体数値シミュレーションにおける AND フィルタの有効性を確認した。

第 3 章では 3DPLIC に基づく収束計算を伴う界面の平面近似を用いた高精度界面捕捉手法の検討がなされ、計算手法に関する各種検討と手法の精度検証を行った。3DPLIC による識別関数移流計算手法は、第 2 章の手法とは対照的に識別関数の移流計算自体の精度向上を検討したものである。通常平面と計算セル体積の位置関係によって多数の場合分けが必要とされる既往の 3 次元 PLIC に対して、これらの位置関係によらずに統一的なアルゴリズムによって界面近似平面を求める手法を提案した。特にプログラム実装段階においては実数の値による場合分けを多用すると機械誤差程度の数値誤差によって想定される条件分岐が行われない場合も生じるため、安定した数値計算の実行のためにそのような条件分岐を可能な限り少なくしたアルゴリズムを開発した。さらに、この計算手法に関する各種検討と手法の精度検証を行った。

第 4 章では第 2 章および第 3 章にて検討された高精度自由界面捕捉を利用することを前提として識別関数の空間勾配が自由界面付近で急変する条件の下で安定して表面張力を評価する手法について提案した。提案手法では、自由界面に働く表面張力を計算セル体積によって切り取られる推定界面の周囲に働く表面張力の和として扱う。計算セルによって切り取られる推定界面の周囲延長は、あらかじめ用意された界面形状パターンを当てはめることによって推定する。以上のアルゴリズムにより、界面を含む計算セルのみの情報を用いて表面張力を評価することが可能となった。

提案手法の基礎的な検証として気液界面の曲率の再現性およびラプラス則の再現性について数値計算を行い、概ね妥当な結果を得た。

第 5 章では第 2 章、第 3 章、第 4 章にて検討した手法を組み合わせる種々の自由界面を有する気液混相流れ場に適用し、その有効性を確認した。第 5.1 節においては表面張力を無視できる気液混相流れ場を対象とした。一方で、第 5.2 節においては表面張力を無視できない気液混相流れ場を対象とした。

## 既往研究

混相流れの数値シミュレーションにおいては、界面識別手法について様々な手法が研究されている。界面識別手法は界面運動の記述法の違いにより、界面追跡法、ALE 法 [17] および界面捕捉法に大別される。上記以外にも、多くの界面表現方法が提案されているが、本節ではこれらの中でも特に本研究内容と密接に関連する界面捕捉法関連の既往研究につ

いて記述する.

界面捕捉法のうちの一つである Level Set 法 [5] においては距離関数によって界面位置を算出するため, VOF 法 [4] とは異なり界面形状を表現する能力に優れている. これは, 距離関数に空間的な連続性が仮定されているため通常の空間内挿法で界面位置を算出できるためである. ただし, 質量保存性や距離関数移流後の再構築過程の計算負荷など, 解決すべき問題も残されている. 質量保存性の問題に対しては, 界面付近に仮想的に配置されたラグランジュ的に運動する粒子を利用した手法 [9, 11] が有効とされている. 近年においては, VOF 法と Level Set 法の長所を利用したカップリング手法 (Coupled Level Set and Volume of Fluid, CLSVOF) [18, 19] に関する研究も精力的に行われている.

VOF 法においては, 流体の大変形に比較的容易に追従できることが利点として挙げられるが, VOF 関数の移流計算の精度が VOF 関数の界面表現精度に大きく影響すること, VOF 関数自体に界面形状の情報が含まれないことから, 界面形状の表現能力はあまり高くないとされる. また, 初期の VOF 法 [4] においては気液混相流れのうち気体側の領域は計算対象とせず液体側のみを計算対象としており, 移動変形する自由水面に対して常に適切な境界条件を設定する必要があった. このため, 界面形状に応じた境界条件の設定が複雑になるという問題も VOF 法の一つの課題であった [20]. また, 自由水面の境界条件の設定を適切に行わなければ体積保存性を満たすことが難しい.

気液混相流れ場の数値計算については, 初期の VOF 法のように片側の流体のみを計算対象とする場合と両方の流体を計算対象とする場合がある. 両方の流体を計算対象とする場合には, それぞれの流体相で流体の支配方程式を解く方法と, 計算領域全体に含まれる流体を平均化した混合流体として扱う方法 (一流体モデル) がある.

前者の手法においては界面形状に応じた境界条件を陰的に満足させる ghost fluid 法 [21] と呼ばれる方法が開発されている. ただし, ghost fluid 法は通常 Level Set 法と共に用いられる. 後者の方法を用いる場合には前者の方法と比較して自由界面における複雑な境界条件処理が必要ないという利点を有する. 識別関数として体積占有率を用いる場合も多く, このような数値解法に対しても VOF 法という名称を用いる例も見られる [22]. 本研究では, 識別関数として体積占有率を用いるものの, 流体計算部分是一流体モデルとして取り扱っているため, 敢えて VOF 法の名称を用いていない.

体積占有率を識別関数として用いる場合には, 非定常移流計算によって識別関数の不連続性が保たれなくなると流体の界面の位置がぼやけ, 正確な流体運動の予測が困難となる. このため, 移流計算に伴う識別関数の数値拡散を抑えることが混相流の数値シミュレーションを行う上で重要な要素となるため, 不連続点あるいは境界部にて急峻な勾配を持つ識別関数の移流方程式の解法については非常に多くの研究 [23–26] がなされてきた. 例えば, ドナーアクセプターと呼ばれる解法系 [23, 24] では, 風上差分と風下差分を使い分けること



によって数値拡散を抑えながら数値的に安定な条件下で識別関数移流計算を行う代数的解法が検討されている。また、識別関数移流計算を行うとともに計算セル内での界面形状を計算格子に平行な平面でモデル化する Simplified Line Interface Calculation (SLIC) [25] や PLIC [26–31] に代表される幾何学的解法系も検討されている。PLIC を用いた界面体積追跡法を使用し、一流体モデルで混相流場を解く数値解法として、Multi-interface Advection and Reconstruction Solver (MARS) が挙げられる [32]。また、計算セル内の界面形状を逆正接関数にて近似する手法が知られている [33]。直接界面形状を推定する手法の他には、被移流関数を正接関数によって変換し、変換後の被移流関数を移流させ、正接逆変換するという方法も提案されている [34]。ただし、体積保存性は満たされないことに注意が必要である。

上記に挙げられるような正確な移流計算を追求する研究とは別に、移流計算後に移流計算によって生じた数値誤差を修正する方向性での研究もなされている。例えば牛島ら [35] は、移流計算後に数値誤差フラックスの移流計算にて移流計算に伴う数値誤差の抑制を試みている。So ら [36] は、一次風上差分法によって生じた数値拡散を修正するために、移流計算後のスカラーに対して負の拡散方程式を解くことによって界面の鋭敏化を図っている。この手法は、一次風上差分法に対しては有効に機能するが、他の移流スキームに対して同様に有効であるとは限らない。また、流速場の情報を必要としている。高田ら [37] は、カーン・ヒリアード方程式を解くことによって移流計算を行っている。この手法の特徴は、通常の移流拡散方程式のうち、拡散項に当たる部分に数値拡散抑制の効果を持つ化学ポテンシャル項がついているため、移流計算の時間発展とともに界面幅が広がるというような不具合は発生しない。化学ポテンシャル項は、数値拡散抑制効果を期待して付け加えられたものではないが、移流計算による数値拡散を修正する働きをするため、誤差修正の方法に分類した。池端・肖は、界面鋭敏化の方法として STAA 法を提案している [38, 39]。STAA 法も、移流計算によって数値拡散した界面付近のスカラー勾配を鋭敏化させるために繰り返し界面付近のスカラー分布を修正するものである。

本研究では、階段関数にて表現できる体積占有率を識別関数とし、識別関数の移流計算に伴う数値誤差の修正手法について検討した。数値誤差修正の手法として数値誤差フラックスを定義する点において、牛島らの手法 [35] と似ている。

本研究における提案手法においては、一次元非圧縮流れ場における移流方程式の理論解と離散化された変数の差異から求められた数値解の誤差を数値誤差フラックスとして定式化した。多次元非圧縮流れ場においては同様の定式化が困難であるため、多次元空間における各隣接セル方向について一次元流れ場の考え方を適用した。

表面張力評価法においては、通常よく CSF モデル [15] が使用されている。CSF モデルにおいては、異なる流体相の間に有限幅の界面領域を定義し、表面力である表面張力を界

面領域内の体積積分に変換するモデルである。有限の界面幅を必要とするため、気泡を表現するための計算セル数の総数が増えるなど、課題も有している。CSF モデルの他には、CSS モデル [40] などが提案されている。

## 参考文献

- [1] Unverdi S.O. and Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flow. *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 25–37, 1992.
- [2] Glimm J., Graham M.J., Grove J., Li X.L., Smith T.M., Tan D., Tangerman F., and Zhang Q. Front-tracking in two and three dimensions. *J. Comput. Math*, Vol. 7, pp. 1–12, 1998.
- [3] Harlow F.H. and Welch J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *The Physics of Fluids*, Vol. 24, pp. 2182–2189, 1976.
- [4] Hirt C.W. and Nichols B.D. Volume of fluid (VOF) methods for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, Vol. 39, pp. 201–225, 1981.
- [5] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 79, No. 1, pp. 12–49, 1988.
- [6] Smereka P. Sussman M. and Osher S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, Vol. 114, No. 1, pp. 146–159, 1994.
- [7] Osher S. Mulder W. and Sethian J.A. Computing interface motion in compressible gas dynamics. *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 209–228, 1992.
- [8] Unverdi S.O. and Tryggvason G. Computations of multi-fluid flows. *Physica D*, Vol. 60, p. 70, 1992.
- [9] Ferziger J. Enright D., Fedkiw R. and Mitchell I. A Hybrid Particle Level Set Method for Improved Interface Capturing. *J. Comput. Phys.*, Vol. 183, No. 1, pp. 83–116, 2002.

- [10] Hieber S.E. and Koumoutsakos P. A Lagrangian particle level set method. *J. Comput. Phys.*, Vol. 210, pp. 342–367, 2005.
- [11] Leung S. and Zhao H. A grid based particle method for moving interface problems. *J. Comput. Phys.*, Vol. 228, No. 8, pp. 2993–3024, 2009.
- [12] 藤岡奨, 牛島省. VOF 関数の移流計算における数値拡散抑制手法の検討. *Transaction of JSCES*, No. 20100020, 2010.
- [13] 藤岡奨, 牛島省. 収束計算を伴う界面捕捉手法による 3 次元 PLIC のアルゴリズム. 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 68, No. 2, 2012. I207-I216(応用力学論文集 Vol.15).
- [14] 藤岡奨, 牛島省. 幾何的境界面再構築による表面張力評価法. 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 67, No. 2, 2011. I75-I85(応用力学論文集 Vol.14).
- [15] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 335–354, 1992.
- [16] 牛島省, 山田修三, 藤岡奨, 瀬津家久. 3 次元自由水面流れによる物体輸送の数値解法 (3D MICS) の提案と適用性の検討. 土木学会論文集, Vol. 810/II-74, pp. 79–89, 2006.
- [17] 桜庭雅明, 田中聖三, 檜山和男. PC クラスタを用いた ALE 有限要素法による非線形自由表面流れ解析. 応用力学論文集, Vol. 4, pp. 113–120, 2001.
- [18] Zhaoyuan Wang, Jianming Yang, and Frederick Stern. A new volume-of-fluid method with a constructed distance function on general structured grids. *J. Comput. Phys.*, Vol. 231, pp. 3703–3722, 2012.
- [19] Sussman M. A second order coupled level set and volume-of-fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. *J. Comput. Phys.*, Vol. 187, No. 1, pp. 110–136, 2003.
- [20] Miyata H. Finite-Difference Simulation of Breaking Waves. *J. Comput. Phys.*, Vol. 65, pp. 179–214, 1986.
- [21] Fedkiw R., Aslam T., Merriman B., and Osher S. A Non-Oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). *J. Comput. Phys.*, Vol. 152, pp. 457–492, 1999.

- [22] Tomiyama Akio, Zun Iztok, Sou Akira, and Sakaguchi Tadashi. Numerical analysis of bubble motion with the VOF method. *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 141, No. 69-82, 1993.
- [23] Lafaurie B., Nardone C., Scardovell R., Zaleski S., and Zanetti G. Modeling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comput. Phys.*, Vol. 113, pp. 134–147, 1994.
- [24] Ubink O. and Issa R.I. A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *J. Comput. Phys.*, Vol. 153, pp. 26–50, 1999.
- [25] Noh W.F. and Woodward P. SLIC(simple line interface method). *Lecture Notes in Physics*, Vol. 24, pp. 330–340, 1976.
- [26] Youngs D.L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Vol. 24, pp. 273–285, 1982.
- [27] Ashgriz A. and Poo J.Y. FLAIR:flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *J. Comput. Phys.*, Vol. 93, pp. 449–468, 1991.
- [28] Harvie D.J.E. and Fletcher D.F. A New Volume of Fluid Advection Algorithm: The Stream Scheme. *J. Comput. Phys.*, Vol. 162, pp. 1–32, 2000.
- [29] Puckett E.G., Almgren A.S., Bell J.B., Marcus D.L., and Rider W.J. A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 130, pp. 269–282, 1997.
- [30] Lopez J., Hernandez J. Gomez P., and Faura F. An improved PLICVOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 208, pp. 51–74, 2005.
- [31] Lopez J., Zanzi C., Gomez P., Faura F., and Hernandez J. A new volume of fluid method in three dimensions-Part II: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-Bezier fit. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 58, pp. 923–944, 2008.
- [32] 功刀資彰. 自由界面を含む多相流の直接数値解析法. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 63, No. 609, pp. 1576–1584, 1997.
- [33] Yokoi K. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. *J. Comput. Phys.*, Vol. 226, pp. 1985–2002, 2007.

- [34] Yabe T. and Xiao F. Description of Complex and Sharp Interface with Fixed Grids in Incompressible and Compressible Fluid. *Computers Math. Applic.*, Vol. 29, No. 1, pp. 15–25, 1995.
- [35] 牛島省, 吉田圭介, 竹村雅樹, 瀬津家久. フラックス制御を利用する移流方程式の 5 次精度保存形スキーム. 土木学会論文集, No. 747/II-65, 2003.
- [36] So K.K., Hu X.Y., and Adams N.A. Anti-diffusion method for interface steepening in two-phase incompressible flow. *J. Comput. Phys.*, Vol. 230, pp. 5155–5177, 2011.
- [37] 高田尚樹, 広川景俊, 林公祐, 富山明男. 二相流数値シミュレーションの界面移流・再構成計算に対するカーン・ヒリアル方程式の適用性の検討. 計算工学講演会論文集, Vol. 11, pp. 415–416, 2006.
- [38] 池端昭夫, 肖鋒. 保存型 cip 法に基づく運動方程式解法および保存型自由界面捕獲スキームを用いた多相流体解析. 日本機械学会計算力学講演会講演論文集 JST 資料番号:L0203A, Vol. 15, pp. 449–450, 2002.
- [39] 池端昭夫, 肖鋒. 保存型自由界面捕獲スキームと固気液三相流への適用. 日本機械学会年次大会講演論文集 JST 資料番号:X0587B, Vol. 3, pp. 301–302, 2002.
- [40] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comput. Phys.*, Vol. 113, pp. 134–147, 1994.

## 第2章 局所勾配型非数値拡散フィルタの開発

### 2.1 非数値拡散フィルタの理論背景

#### 2.1.1 階段関数の移流計算に伴う数値誤差

本研究においては、気液混相流れ場の界面捕捉および界面にはたらく表面張力評価手法の構築がテーマである。序論にて述べられたとおり、気液混相流の数値計算において識別関数を用いて界面識別を行う場合、識別関数の移流計算の精度が界面捕捉の精度に大きく影響する。このため、識別関数の移流計算の計算精度を高めることが重要である。

移流計算に関しては、フラックス評価の高精度化と数値計算としての安定性という要求を満たすために多くの先行研究 [1, 2] がなされており、種々の高精度な移流計算スキームが開発されている。これらの移流スキームは被移流関数が空間的に微分可能である移流計算に対しては有効である。

一方で被移流関数が階段関数のようにある境界において値が不連続に変化する場合は、主に2つの要因が不連続点の移流計算の精度に影響する。

一つ目の要因は離散化による影響である。本研究では流体の支配方程式を有限体積法にて離散化したが、有限体積法による離散化の過程で不連続点を含む被移流関数が空間平均されることに伴い、不連続点の正確な位置情報が失われる。二つ目の要因は移流計算に伴う数値拡散である。被移流関数は移流計算を行うより前に一つ目の要因によって既に空間平均されて界面位置情報が失われているが、移流計算の数値拡散の影響により界面位置の特定が更に困難となる。

本研究では、識別関数の移流計算の高精度化のために階段関数の移流計算を有限体積法による離散化のもとで高精度に行う手法について検討した。

以下では、任意の移流スキームを用いて階段関数の移流問題を数値的に解いた場合に発生する数値誤差の発生機構について分析する。

今、1次元の階段関数移流問題を式 (2.1) で定義する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

ただし、 $\phi(x)$  は式 (2.2) で定義される階段関数であり、 $H(x)$  は Heaviside の階段関数で

ある.

$$\phi(x) = H(x_h) = \begin{cases} 1 & x > x_h \\ 0 & x \leq x_h \end{cases} \quad (2.2)$$

対象とする1次元流れ場は非圧縮性であると仮定すると, 式(2.3)が成り立つ.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (2.3)$$

式(2.3)と式(2.1)から, 保存系の移流方程式である式(2.4)が得られる.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.4)$$

計算領域  $[x_1, x_{m+1}]$  を  $m$  等分して作られたコントロールボリューム  $L_i[x_i, x_{i+1}]$  を計算セルとして定義する.  $L_i$  上で式(2.4)を積分すると, 式(2.5)が得られる.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{L_i} \phi dx + \int_{L_i} \frac{\partial u \phi}{\partial x} dx = 0 \quad (2.5)$$

$i$  番目 ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) の計算セルに対してセル平均値  $\bar{\phi}_i$  が式(2.6)で得られる.

$$\bar{\phi}_i = \frac{\int_{L_i} \phi dx}{\Delta x} = \frac{\int_{L_i} H(x_h) dx}{\Delta x} = \begin{cases} 1 & x_h \leq x_i \\ (x_{i+1} - x_h)/\Delta x & x_i < x_h \leq x_{i+1} \\ 0 & x_{i+1} \leq x_h \end{cases} \quad (2.6)$$

ただし,  $(x_{m+1} - x_1)/m = \Delta x$  とする. 式(2.5)を時間方向に1次精度で離散化すると, 式(2.7)が得られる.

$$\bar{\phi}_i^{n+1} = \bar{\phi}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} \quad (2.7)$$

ただし,  $\Delta t$  は時間刻みであり,  $n$  は時間ステップを示す.  $q_i^n$  は  $n$  ステップにおける任意の移流スキームによって得られるセル境界  $i$  におけるフラックス  $u\phi$  である. 式(2.7)により,  $n+1$  ステップにおけるセル平均値  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  を得ることができる. 一般に,  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  を精度よく求めるためには計算セル境界におけるフラックス  $q$  を高精度に評価することが重要であり, 高精度フラックス評価のための先行研究が数多く存在する. 本節では, どのような移流スキームを用いたかに関わらず, 式(2.7)にて得られた  $n+1$  ステップにおけるセル平均値  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  を数値解と呼ぶこととする.

一方で, 式(2.1)にて定義される移流方程式は理論解をもち, 式(2.8)に示される.

$$\phi = H(x_h - ut) \quad (2.8)$$

式 (2.8) により求めた  $n + 1$  ステップ目のセル平均値を  $\hat{\phi}_i^{n+1}$  とすると、式 (2.9) が得られる。

$$\hat{\phi}_i^{n+1} = \frac{\int_{L_i} H(x_h^n - u\Delta t) dx}{\Delta x} = \begin{cases} 1 & x_h + u\Delta t \leq x_i \\ (x_{i+1} - u\Delta t - x_h)/\Delta x & x_i < x_h + u\Delta t \leq x_{i+1} \\ 0 & x_{i+1} \leq x_h + u\Delta t \end{cases} \quad (2.9)$$

式 (2.9) によって得られた  $\hat{\phi}_i^{n+1}$  は、移流方程式の理論解を有限体積法にて離散化したものであり、以下では簡単のために理論解と呼ぶ。

式 (2.9) と式 (2.7) の差から、理論解と数値解の差異  $\Delta\phi_i$  を求めることが可能で、式 (2.10) に示される。

$$\begin{aligned} \Delta\phi_i^{n+1} &= \hat{\phi}_i^{n+1} - \bar{\phi}_i^{n+1} = \frac{\int_{L_i} H(x_h^n - ut) - H(x_h^n) dx}{\Delta x} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} \\ &= \Phi_i^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} \end{aligned} \quad (2.10)$$

ここで、 $\Phi_i$  は、式 (2.10) 第三式第一項の積分値であり、式 (2.11) に示される。

$$\Phi_i^{n+1} = \begin{cases} (x_i - u\Delta t - x_h^n)/\Delta x & x_i - u\Delta t \leq x_h^n < x_i \\ -u\Delta t/\Delta x & x_i \leq x_h^n < x_{i+1} - u\Delta t \\ (x_h^n - x_{i+1})/\Delta x & x_{i+1} - u\Delta t \leq x_h^n < x_{i+1} \\ 0 & \text{other} \end{cases} \quad (2.11)$$

$\Delta\phi_i^{n+1} = 0$  を満たすためには、 $q_i^n$  の数値評価精度を向上させる方法もあるがこの方法は第 3 章で検討する。本章では、数値解である  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  が既に求められた状態を前提条件として、誤差修正する方法を考える。 $i$  から  $i + 1$  番目の計算セルへの数値誤差修正量を  $\bar{q}_{i+1}$  とし、修正後の被移流関数を  $\phi_{c,i}^{n+1}$  とすると、以下の保存系の移流方程式を考えることができる。また、本手法では数値誤差修正量  $\bar{q}_{i+1}$  を保存系の移流方程式で扱うことから、数値誤差フラックスと呼ぶこととする。

$$\phi_{c,i}^{n+1} = \bar{\phi}_i^{n+1} + \Delta\phi_i^{n+1} = \bar{\phi}_i^{n+1} - (\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) \quad (2.12)$$

$\bar{q}_{i+1}$  については、被移流関数の不連続点  $x_h$  の位置が  $n$  ステップ目と  $n + 1$  ステップ目の間でセル境界を通過しない場合 (以下、ケース A) と通過する場合 (以下、ケース B) の 2 通りに分けて考える。

まず、不連続点の位置  $x_h$  がセル境界を通過しない場合 (ケース A) について考える。詳細は付録 A に示すが、各セル境界における数値誤差フラックス  $\bar{q}_i$  が式 (2.13) によって得



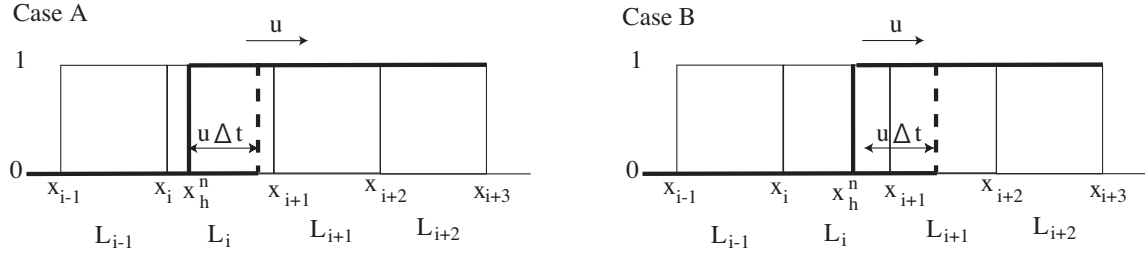


図 2.1: 階段関数の 1 次元移流計算における場合分け

られる.

$$\begin{aligned}
 \bar{q}_{i-1} &= 0 \\
 \bar{q}_i &= \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \\
 \bar{q}_{i+1} &= 1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} \\
 \bar{q}_{i+2} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

以上により, 数値誤差の修正は式 (2.12) による保存系の移流方程式によって可能であり, 誤差フラックス  $\bar{q}_i$  が数値解  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  を用いて表される.

次に, 不連続点の位置  $x_h$  がセル境界を通過する場合 (ケース B) について考える. ケース B においてもケース A と同様, 詳細は付録 A に示すが, 数値誤差フラックス  $\bar{q}_i$  は式 (2.14) によって得られる.

$$\begin{aligned}
 \bar{q}_{i-1} &= 0 \\
 \bar{q}_i &= \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \\
 \bar{q}_{i+1} &= \bar{\phi}_i^{n+1} + \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \\
 \bar{q}_{i+2} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

以上をまとめると, 数値誤差の修正は, 式 (2.12) によって表される保存系の移流方程式に従う.

理論解への修正量が数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  を用いて表現されているため, 一旦  $n+1$  ステップ目の数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  を求めた後, 数値解から理論解への修正が可能である.

階段関数の 1 次元移流方程式の場合に限られるが, 式 (2.12) および式 (2.13) あるいは式 (2.14) を用いて  $n+1$  ステップ目の数値解から理論解へ修正することが可能である.

### 2.1.2 階段関数の移流計算における minmod 関数による勾配制限関数の効果

1 次風上差分あるいは minmod 関数による勾配制限子を用いた TVD スキーム [3, 4] を用いて移流計算した場合, 前節にて議論された数値誤差フラックスの評価は以下の通り単

純化される。TVD スキームを用いた場合、 $i$  番目のセル境界における誤差フラックスは以下の式で表される。ただし、 $\kappa$  と  $\beta$  は数値的安定性と精度に関連したパラメーターである。

$$q_i^{\text{TVD}} = q_i^{\text{upw}} + \frac{u_i^+}{4} \left[ (1 + \kappa) \Phi_i^{+C} + (1 - \kappa) \Phi_i^{+U} \right] - \frac{u_i^-}{4} \left[ (1 + \kappa) \Phi_i^{-C} + (1 - \kappa) \Phi_i^{-U} \right] \quad (2.15)$$

$$q_i^{\text{upw}} = u_i^+ \phi_{i-1} + u_i^- \phi_i \quad (2.16)$$

$$u^\pm = \frac{1}{2}(u \pm |u|) \quad (2.17)$$

$$\Phi_i^{+C} = \text{minmod} \left[ \phi_i - \phi_{i-1}, \beta(\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) \right] \quad (2.18)$$

$$\Phi_i^{+U} = \text{minmod} \left[ \phi_{i-1} - \phi_{i-2}, \beta(\phi_i - \phi_{i-1}) \right] \quad (2.19)$$

$$\text{minmod}(p, q) = \frac{1}{2} \left[ \text{sgn}(p) + \text{sgn}(q) \right] \min[|p|, |q|] \quad (2.20)$$

階段関数の移流計算に TVD スキームを適用した場合、不連続点周辺でのセル境界におけるフラックスは以下の通り得られる。

$$\begin{aligned} q_{i-2} &= 0 \\ q_{i-1} &= 0 \\ q_i &= 0 \\ q_{i+1} &= q_i^{\text{upw}} + q_i^{*\text{TVD}}(\beta, \kappa) \\ q_{i+2} &= q_i^{\text{upw}} = u \end{aligned} \quad (2.21)$$

式 (2.21) によると、 $q_{i+1}$  を除いて理論的に求められるセル境界フラックスと一致することが分かる。特に重要であるのは、 $q_i$  および  $q_{i+2}$  が理論解と一致していることであり、本節で 1 次風上差分あるいは TVD スキームを用いている理由はここにある。 $q_i$  および  $q_{i+2}$  が理論解と一致するアルゴリズムを採用している移流スキームであれば、1 次風上差分あるいは TVD スキームではなくても本節の議論が適用できる。 $q_{i+1}$  はパラメータ  $\kappa$  および  $\beta$  に依存するため、常に理論解と一致することは期待できない。式 (2.21) によるセル境界フラックスを用いて更新した次ステップの数値解  $\bar{\phi}$  は以下の通り求められる。

$$\bar{\phi}_{i-1}^{n+1} = \phi_{i-1}^{\text{TVD}, n+1} = 0 \quad (2.22)$$

$$\bar{\phi}_i^{n+1} = \phi_i^{\text{TVD}, n+1} = \phi_i^n - (q_i^{\text{upw}} + q_i^{*\text{TVD}}(\beta, \kappa)) \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (2.23)$$

$$\bar{\phi}_{i+1}^{n+1} = \phi_{i+1}^{\text{TVD}, n+1} = \phi_{i+1}^n - q_i^{*\text{TVD}}(\beta, \kappa) \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (2.24)$$

$$\bar{\phi}_{i+2}^{n+1} = \phi_{i+2}^{\text{TVD}, n+1} = 1 \quad (2.25)$$

式 (2.22-2.25) によって得られる  $\bar{\phi}$  を式 (A.13) および式 (A.22) へ代入すると、ケース A およびケース B における誤差フラックスを得ることができる。

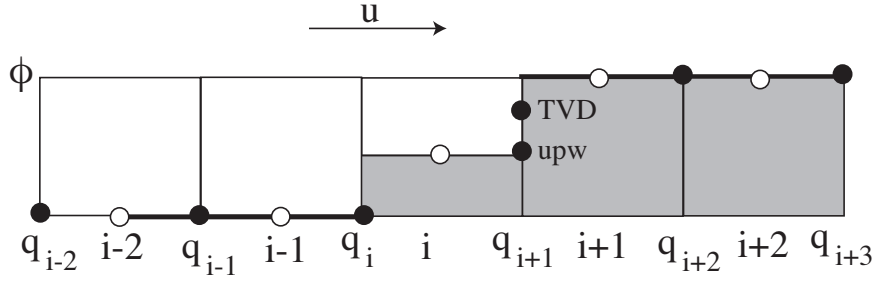


図 2.2: 1 次風上差分あるいは TVD スキームによって得られるセル境界値 (1 次元移流問題)

$$\begin{cases} \bar{q}_{i-1} = 0 & \bar{q}_i = 0 & \bar{q}_{i+1} = 1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} & \bar{q}_{i+2} = 0 & x_{i+1} - x_h > u\Delta t & (\text{ケース A}) \\ \bar{q}_{i-1} = 0 & \bar{q}_i = 0 & \bar{q}_{i+1} = \bar{\phi}_i^{n+1} & \bar{q}_{i+2} = 0 & x_{i+1} - x_h \leq u\Delta t & (\text{ケース B}) \end{cases} \quad (2.26)$$

1 次風上差分あるいは TVD スキームを適用した場合, 式 (2.21) による推定誤差により,  $n+1$  ステップ目の数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  は以下の通りに得られる.

$$\begin{cases} \bar{\phi}_{i-1}^n = 0 \\ \bar{\phi}_i^n = \frac{x_{i+1} - x_h}{\Delta x} \\ \bar{\phi}_{i+1}^n = 1 \\ \bar{\phi}_{i+2}^n = 1 \end{cases} \quad \begin{cases} q_{i-1} = 0 \\ q_i = q_i^{\text{upw}} = q_i^{\text{TVD}} = 0 \\ q_{i+1} = q_{i+1}^{\text{upw}} \quad \text{or} \quad q_{i+1}^{\text{TVD}} \\ q_{i+2} = q_{i+2}^{\text{upw}} = u \end{cases} \quad \begin{cases} \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} = -\frac{\Delta t}{\Delta x} q_i \\ \bar{\phi}_i^{n+1} = \frac{x_{i+1} - x_h}{\Delta x} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{i+1} - q_i) \\ \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} = 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{i+2}^{\text{upw}} - q_{i+1}) \\ \bar{\phi}_{i+2}^{n+1} = 1 \end{cases} \quad (2.27)$$

式 (2.27) の  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  および  $\bar{\phi}_{i+1}^{n+1}$  に関する式から, 以下の式 (2.28) および式 (2.29) が得られる.

$$x_{i+1} - x_h = \Delta x \bar{\phi}_i^{n+1} + \Delta t q_{i+1} \quad (2.28)$$

$$u\Delta t = \Delta x (1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1}) + \Delta t q_{i+1} \quad (2.29)$$

式 (2.28) と式 (2.29) の差をとることによって式 (2.30) が得られる.

$$\text{sgn}[x_{i+1} - x_h - u\Delta t] = \text{sgn}[\bar{\phi}_i^{n+1} - (1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1})] \quad (2.30)$$

式 (2.26) および式 (2.30) から  $\bar{q}_{i+1}^{n+1}$  を求める式として式 (2.31) を得ることができる. 式 (2.31) によってケース A, ケース B の場合分けが,  $\min$  関数によって扱われることとなる.

$$\bar{q}_{i+1}^{n+1} = \min[1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1}, \bar{\phi}_i^{n+1}] \quad (2.31)$$

本節で検討した 1 次風上差分および TVD スキームを移流計算に用いた場合においては, 誤差フラックス  $\bar{q}_{i+1}$  に関する数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  のみ誤差修正すれば理論解と一致する解が得

られ、他の移流スキームを用いた場合と比較して誤差修正のプロセスが簡単であることが分かる。

移流スキームとして 1 次風上差分あるいは minmod 関数による勾配制限子を用いた TVD スキームを用いた場合から導かれた式 (2.31) を用いることによって、数値誤差修正の簡単なアルゴリズムを構築することが可能である。ただし、このアルゴリズムが理論解を厳密に保証できるのは移流計算が 1 次風上差分あるいは TVD スキームあるいはこれらのスキームと同様の性質を持つ移流スキームであることに注意する。

### 2.1.3 2 次元以上の空間における階段関数の移流計算

本節では、2 次元以上の多次元空間における階段関数の移流方程式問題の数値解法について考察する。

2 次元以上の多次元問題となると問題は急に複雑になる。1 次元の場合であれば非圧縮性の流速場は空間的に一様であるため、理論解を求めることが容易で、移流スキームによって内挿されたセル境界の値とクーラン数から移流計算に伴う数値誤差が容易に得られ、求められた数値誤差評価に従って数値誤差を修正することができる。

2 次元以上の問題になると一般的には流速場が一様とは限らないことにより、移流方程式の理論解を得ることが困難であることから理論解からの差分によって数値誤差を評価することが困難となる。従って、1 次元の移流問題で検討した数値誤差の修正方法を同様に導くことが出来ない。

あるいは、理論解を用いずに各移流スキームから解析的に求まる数値拡散量を評価して修正する方法も考えられるが、移流スキームごとに異なる手法となるために、汎用性に欠けるという欠点がある。

以上に述べられたように 2 次元以上の空間における識別関数の移流計算に伴う数値誤差量の正確な評価は数学的にも非常に困難である。

ただし、有限体積法による離散化を前提とすると、1 次元移流問題の分析から類推されるように、1 ステップの移流計算によって生じる数値誤差を含む計算セルは不連続点を含む計算セルの周辺 4 セル程度であることができる。

また、問題の本質は 1 次元問題と同様、有限体積法による離散化と移流計算に伴う数値拡散であることから、1 次元問題の分析により得られた式 (A.12) を 2 次元以上の問題に拡張して用いる形でアルゴリズムを検討した。拡張されたアルゴリズムでは、1 次元移流問題とは異なり、理論解を完全に復元するまでは至らないものの、主に有限体積法による離散化および移流計算に起因する被移流関数の数値拡散をある程度抑えることが期待される。

また、多次元移流問題への拡張に当たり、本研究では手法の計算精度と共に、可能な限

りアルゴリズムが簡単であり、多次元化が容易であること、どのような移流スキームを用いた場合でも有効に作用すること、を重視してアルゴリズムを検討した。

実際のコーディングにおける使いやすさを重視し、移流計算がどのような移流スキームによって行われたかによらず効果を発揮することを優先したため、特定の移流スキームによって発生する数値拡散項評価によって数値拡散を修正するのではなく、用いられている移流スキームや流速場およびセル境界におけるフラックスが既知でなく、有限体積法によって離散化され、移流計算を行った後のボクセルデータのみが与えられた状態から数値拡散を修復するという条件の下でアルゴリズムを検討した。このように条件を課すことで、厳密な数値拡散の修復が難しくなる反面、移流スキームやフラックスのデータを必要としないことで、より使いやすい手法となることを目指した。

逆に、これら条件が満たされているとすれば、既存の計算コードに AND フィルタを適用する場合には、移流計算サブルーチンの後に識別関数の配列を引数とする AND フィルタのサブルーチンを挿入するだけで数値拡散が抑制されることとなる。これは、既存の計算コードへの適用が容易であるばかりではなく、既存の移流計算計算コードを修正する必要が全くないという利点も持つ。

既に述べられた通り、多次元の移流問題においては方程式の理論解に基づいた数値誤差評価が困難であるため、被移流関数の質量保存を満たした上での各計算セルの数値誤差修正量の高精度な評価が課題となる。

本研究では、数値誤差修正に伴う質量保存性を満足するため、数値誤差修正の時間発展を式 (A.12) を拡張した形で以下の保存系の方程式を用いて行った。

$$\tilde{\phi}^{n+1}(\mathbf{x}) = \bar{\phi}^{n+1}(\mathbf{x}) - \sum_j \bar{q}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j) \quad (2.32)$$

ただし、数値誤差修正後の被移流関数を  $\tilde{\phi}$  とし、 $\mathbf{x}$  は 2 次元あるいは 3 次元計算領域における計算セルの位置ベクトルを示す。 $\mathbf{e}_j, (j = 1, 2, \dots, J)$  は、隣接セルまでのベクトルであり、特定計算セルの周囲  $J$  個の計算セルとの間の数値誤差フラックスを考慮することを示す。

多次元空間における不連続点を含む関数の移流問題の数値誤差修正の課題について、図 2.3 に一例を挙げて説明する。図の左側には、有限体積法で離散化された識別関数を計算セルごとに棒グラフで表している。図の右側は、離散化前の界面形状を平面的に描いたものである。図中の関数の標記は本節の本文中に使われたものと一致し、 $\phi^n$  が  $n$  ステップ目において与えられる離散化前の識別関数であり、 $\phi^n$  に有限体積法による離散化を施したものが  $\bar{\phi}^n$  である。更に、 $\bar{\phi}^n$  から数値的に  $n+1$  ステップ目を求めたものが  $\bar{\phi}^{n+1}$  であり、AND フィルタによって修正された関数が  $\phi_c^{n+1}$  である。このとき、 $n+1$  ステップ目の理論解  $\hat{\phi}^{n+1}$  が利用可能であれば、 $\hat{\phi}^{n+1}$  を有限体積法で離散化したものと  $\phi_c^{n+1}$  が一致

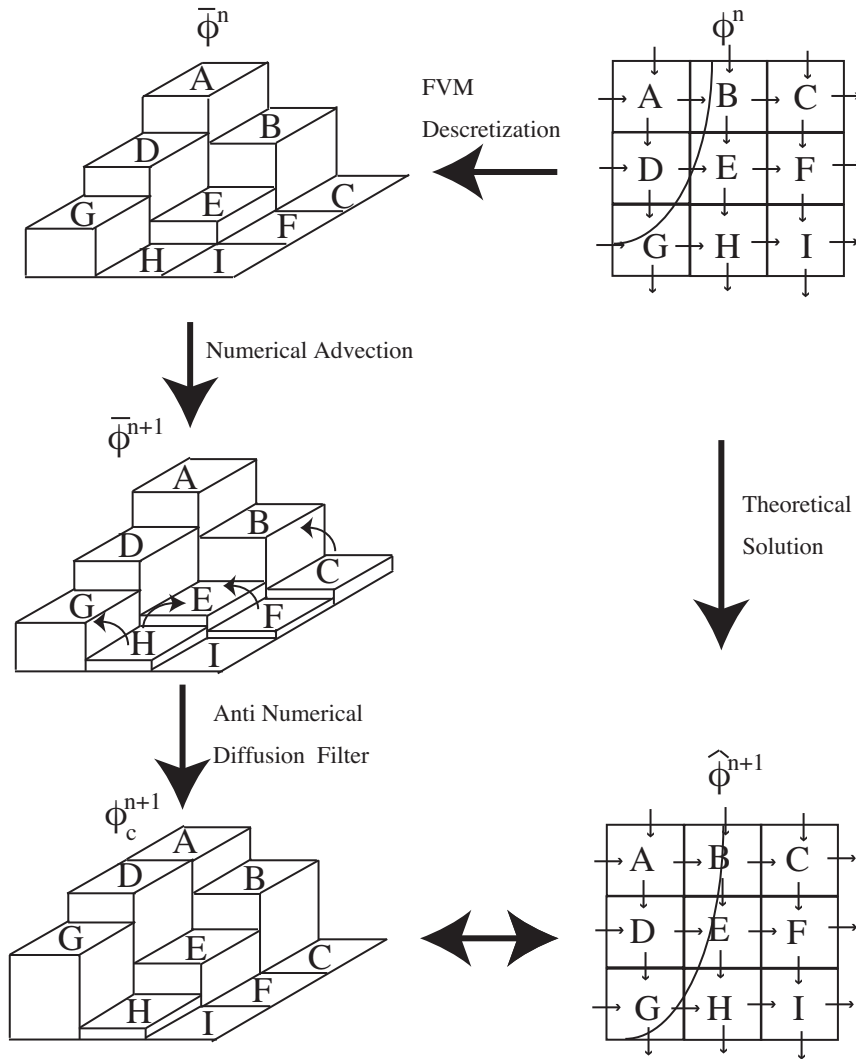


図 2.3: 2次元計算領域における識別関数移流計算と AND フィルタの役割

することが望ましい。数値的に  $\bar{\phi}^{n+1}$  が求められた場合 1 次元移流問題からの類推を適用すると、識別関数が 0 である計算セルと隣接しておりかつ識別関数が正の値をもつ計算セル C,F,E,H は識別関数に数値誤差を含む計算セルと考えられる。

また、計算セル E のように複数の計算セルの移流から生じた数値拡散が特定の計算セルに集まる場合、あるいは特定の計算セルから複数の計算セルへ数値拡散する場合もあり、数値誤差修正量の配分計算も必要となる。

本節の要点をまとめると、1 次元の移流問題では、非圧縮性条件によって一定の流速場となるために数値拡散の修正量は被移流関数の数値解のみから厳密に求めることができたが、2 次元以上の問題では、非圧縮条件を課した条件下でも被移流関数の不連続面の変形を伴う移流問題となるため、理論解の求解が困難であり、数値拡散した被移流関数の修正量を厳密に求めることが困難である。このため、本研究では誤差修正の原理については 1 次元移流問題から得られた式 (2.31) を踏襲しながら、修正量の移動方向や移動量の算定について種々の方法を試した結果、次節に述べられる局所勾配を利用する手法を提案した。

移流問題に与えられる流速場やフラックスの使用を可能とした場合、本研究で検討された手法よりも複雑であるが精度的に更に優れた数値拡散修正法が開発される可能性がある。

## 2.2 非数値拡散フィルタのアルゴリズム

### 2.2.1 アルゴリズムの概要

前節において示された式 (2.31) を用いて、多次元空間における不連続関数の移流問題に対する数値誤差修正アルゴリズムを検討する。1 次元移流方程式の誤差フラックス評価として式 (2.31) が得られているが、多次元問題に拡張したことによって、以下の 2 点において新たにアルゴリズムを構築する必要がある。一つ目は、多次元空間内で 1 次元方向の仮定を適用する場合、どの方向に 1 次元方向の仮定を適用するか決定するアルゴリズムである。このアルゴリズムは、界面位置を検出するアルゴリズムとも解釈できる。次に、単一の計算セルから複数の隣接セルに対して誤差フラックスが定義される場合の誤差配分のアルゴリズムである。これら 2 点のアルゴリズムとしては種々のパターンが考えられる。本研究では、これらのアルゴリズムの一例として被移流関数の局所勾配を利用する方法について検討した。

本節にて検討する AND フィルタは、移流段階において数値拡散した被移流関数の空間分布から数値拡散の影響を取り除いた空間分布を推定する。移流計算後の被移流関数は、**図 2.4** に示されるように 0 と 1 の間に分布しているものと仮定する。移流計算に伴うオーバーシュートあるいはアンダーシュートを含んだ値は適当な前処理にて修正されるものと

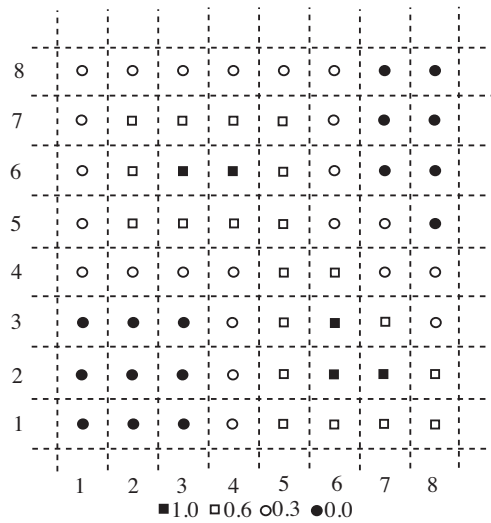


図 2.4: 被移流関数初期空間分布

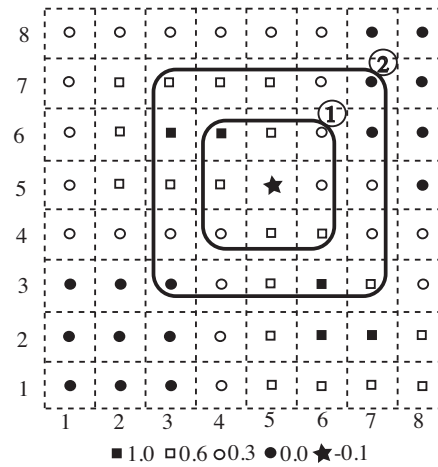


図 2.5: 負値分配フィルタ

する。AND フィルタでは、数値誤差フラックスの方向は被移流関数の勾配が正となる方向に限定されるため、物理的には負の拡散を扱うことに相当する。AND フィルタの計算手順は、以下の通りとなる。

1. 前処理として被移流関数の値を強制的に 0 と 1 の間に収めるフィルタをかける。
2. 各計算セルにて数値誤差フラックスの方向を決める。
3. 数値誤差フラックスの各方向に対して被移流関数の局所勾配を求める。
4. 被移流関数の局所勾配の値に比例配分する形で数値誤差フラックス初期値を決める。
5. 各計算セルにて誤差フラックス受け入れ可能量を決める。

### 2.2.2 フィルタ前処理

AND フィルタが正常に機能するための前提条件として、被移流関数の初期分布は、0 と 1 の間に分布していることが理想的であるが、場合によっては、移流計算に伴うオーバーシュートやアンダーシュートの影響で負の値あるいは 1 以上の値の値を含んだ分布が与えられることもある。

数値計算を安定して継続させるためには、被移流関数を常に 0 と 1 の間に保っておくことが重要と考えられる。そこで、本節で示される前処理を行い、AND フィルタを作用させる前の状態では被移流関数が 0 と 1 の間に収まる理想的な状態を作り出すこととした。



前処理の手順については、以下のようなものが考えられる。移流計算終了後に図 2.5 に示される被移流関数が得られたとする。  $\mathbf{x}_0 = (i, j)$  において負の値である  $-0.1$  が得られているが、これを隣接計算セルの値を用いて修正する。① に示される範囲内の隣接計算セルの値のうち、正のものの和をとり中心の負の値との和  $\psi$  をとる。

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_0) + \sum_{\mathbf{x} \in \textcircled{1}} \max[0, \phi(\mathbf{x})] \quad (2.33)$$

この和  $\psi$  が正であれば、各隣接計算セルから  $\xi(\mathbf{x})$  を負の値の計算セル  $\mathbf{x}_0$  へ供給する。

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \xi(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \textcircled{1} \quad (2.34)$$

$$\phi(\mathbf{x}_0) = \phi(\mathbf{x}_0) + \sum_{\mathbf{x} \in \textcircled{1}} \xi(\mathbf{x}) \quad (2.35)$$

$$\xi(\mathbf{x}) = \frac{\|\phi(\mathbf{x}_0)\|}{\sum_{\mathbf{x} \in \textcircled{1}} \max[0, \phi(\mathbf{x})]} \max[0, \phi(\mathbf{x})] \quad (2.36)$$

和  $\psi$  が正にならない場合は、和をとる領域を広げ、図中の ② に示される領域にて同じ手順をもう一度繰り返す。

逆に 1 以上の  $\phi$  を修正する場合は、次式により  $\phi'$  を求め、 $\phi'$  に対して上記のアルゴリズムを適用する。

$$\phi'(\mathbf{x}) = 1 - \phi(\mathbf{x}) \quad (2.37)$$

### 2.2.3 数値誤差フラックス方向の定義

本節では、与えられた被移流関数が前節に示された前処理によって修正されており、アンダーシュートあるいはオーバーシュートを含まないものとする。AND フィルタは、数値誤差フラックスの移流計算によって数値誤差を含んだ被移流関数を修正するアルゴリズムであるため、数値誤差フラックスの移流計算のためには、数値誤差フラックスの方向  $\mathbf{s}$  と数値誤差フラックス  $q$  を決める必要がある。本節では、このうち数値誤差フラックスの方向  $\mathbf{s}$  を決める手順について詳細を述べる。

数値誤差フラックスの移動方向は、前節では隣接計算セルとの局所勾配によって決めたが、本節では図 2.6 に示されるように、連続して隣接する 4 セル中心点の値を基に定義する。

また、数値誤差フラックスの方向  $\mathbf{s}$  は、初期の段階では  $\tilde{\mathbf{s}}$  にて表現し、 $\tilde{\mathbf{s}}$  の中から最終的に選ばれた方向  $\mathbf{s}$  に対して数値誤差フラックスを移流させる。1 次風上差分および minmod 関数による勾配制限子を用いる TVD スキーム [3] においては、数値誤差フラックス評価に必要な計算セル数は連続 4 セルである。このため、初期段階においては図 2.6

に示されるように，被移流関数の不連続点の位置を検出するために 4 連続した計算セルの  $\phi$  のパターンを検査する．

図 2.6 においては，隣接する計算セル  $a$  および  $b$  と  $a$  と  $b$  を結ぶ線分延長上に位置しそれぞれ  $a$ ， $b$  と隣接する計算セルである  $2a - b$  および  $2b - a$  が示されており， $2a - b$ ， $a$ ， $b$ ， $2b - a$  の順に  $Z$ ， $F_0$ ， $F_1$ ， $F_2$  とラベル付けされている． $a$  と  $b$  の間に被移流関数の不連続点が存在する可能性がある場合， $2a - b$  および  $2b - a$  における値が不連続点を挟んだ両側の値となっていることを確認する．

連続 4 セルの  $\phi$  の分布が以下に示される条件と一致した場合，数値誤差フラックスが定義可能な方向として  $a$  から  $b$  の方向に  $\tilde{s}$  を定義する．式 (2.38) に数値誤差フラックスの初期値である  $\tilde{s}$  を定義する条件を示す．式 (2.38) に示されるように，数値誤差フラックスの方向は，連続 4 セルの先頭のセルの値が 0 で，先頭以外のセルの値が正である時のみ定義される．

$$\tilde{s}(a) \equiv b - a \quad \text{where} \quad \begin{cases} \phi(a) > 0, & \phi(2b - a) > 0 \\ \phi(b) > 0, & \phi(2a - b) = 0 \end{cases} \quad (2.38)$$

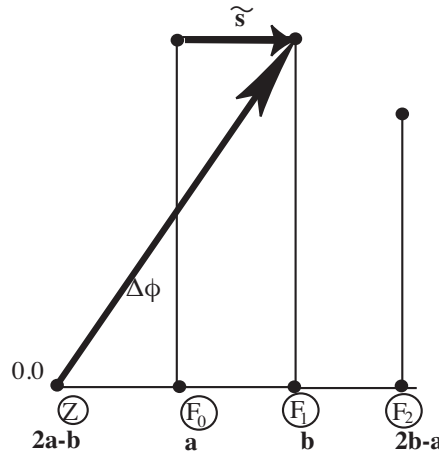


図 2.6: 数値誤差フラックス方向  $\tilde{s}$  の初期化

式 (2.38) による  $a$  を始点とする数値誤差フラックスの方向  $\tilde{s}_i(a)$  の定義の後，図 2.6 および式 (2.39) に示されるとおり  $a$  における局所勾配  $\Delta\phi_i(a)$  を中央差分により求める．

$$\Delta\phi_i(a) = \frac{\phi(a + \tilde{s}_i(a))}{2|\tilde{s}_i(a)|} \quad \text{where} \quad (i \in \tilde{S}) \quad (2.39)$$

ただし, 集合  $\tilde{\mathcal{S}}$  は式 (2.40) により定義される. 式 (2.40) において  $\mathcal{N}$  は自然数の集合であり,  $\tilde{N}(\mathbf{a})$  は計算セル  $\mathbf{a}$  を始点とする初期段階の数値誤差フラックス  $\tilde{\mathbf{s}}_i(\mathbf{a})$  の総数である.

$$\tilde{\mathcal{S}} = \{i \in \mathcal{N} | i \leq \tilde{N}(\mathbf{a})\} \quad (2.40)$$

式 (2.41) に示される通り, 同一の計算セル  $\mathbf{a}$  を始点とする方向  $\tilde{\mathbf{s}}_i(\mathbf{a})$  のうち, 局所勾配  $\Delta\phi_i(\mathbf{a})$  の最大値を与える方向  $\mathbf{s}_k(\mathbf{a})$  を選出し, 数値誤差フラックスの方向を確定する.

$$\mathbf{s}_k(\mathbf{a}) \equiv \tilde{\mathbf{s}}_j(\mathbf{a}) \quad \text{where} \quad \Delta\phi_j(\mathbf{a}) = \max_{i \in \tilde{\mathcal{S}}} \Delta\phi_i(\mathbf{a}) \quad (2.41)$$

2次元平面の問題に対して上記のルールに従って初期段階の数値誤差フラックス  $\tilde{\mathbf{s}}$  を設定した例を図 2.7 に示す.  $\tilde{\mathbf{s}}$  が複数定義されるセル中心点においては, 得られた勾配が最大となる方向を最終的に選出し,  $\mathbf{s}$  とした. 勾配が最大となる方向が複数ある場合には, それらの方向は全て数値誤差フラックス方向  $\mathbf{s}$  として選んだ.

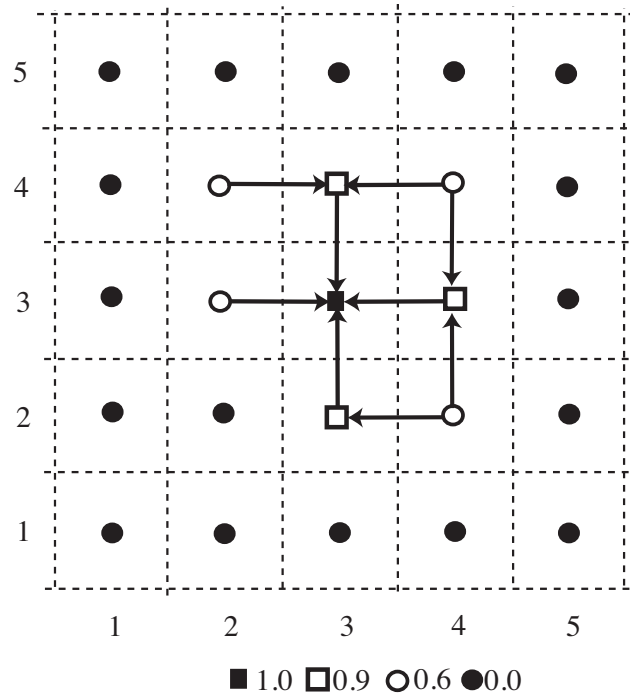


図 2.7: 2次元平面における数値誤差フラックス方向の初期化例

### 2.2.4 数値誤差フラックス量の計算

数値誤差フラックスの方向が計算領域において確定した後，式 (2.31) によって各方向に対する数値誤差フラックス量を評価する．

$$q_{\max} = \min [\phi(\mathbf{a}), 1 - \phi(\mathbf{b})] \quad (2.42)$$

ただし，2次元以上の問題では単一セルから複数セルへの数値誤差フラックスおよび複数セルから単一セルへの数値誤差フラックスが発生するため，式 (2.42) による数値誤差評価では数値誤差フラックスの移流後にオーバーシュートあるいはアンダーシュートを引き起こす可能性がある．この問題を回避するために，式 (2.43) による条件を導入した．

$$0 \leq \phi \leq 1 \quad (2.43)$$

まず，数値誤差フラックスの初期値  $\tilde{q}$  を式 (2.31) にて評価する．当該計算セルに複数の数値誤差フラックス方向が定義されている場合には，各方向に同量の数値誤差フラックスを割り振る．従って，数値誤差フラックスの方向  $\mathbf{s}_k(\mathbf{a})$  に割り当てられる初期値  $\tilde{q}_k(\mathbf{a})$  は式 (2.44) によって与えられる．

$$\tilde{q}_k(\mathbf{a}) = \frac{\phi(\mathbf{a})}{N(\mathbf{a})} \quad (k \in \mathcal{S}) \quad (2.44)$$

ただし，集合  $\mathcal{S}$  は式 (2.45) にて与えられる．

$$\mathcal{S} = \{k \in \mathcal{N} | k \leq N(\mathbf{a})\} \quad (2.45)$$

式 (2.45) において， $N(\mathbf{a})$  は， $\mathbf{a}$  を始点とする数値誤差フラックス方向  $\mathbf{s}_k(\mathbf{a})$  の総数である．**図 2.8** に数値誤差フラックスの初期値  $\tilde{q}$  を求める手順を示す．**図 2.8** において  $(i, j)$  における数値誤差フラックスの方向が  $(i+1, j)$  および  $(i, j+1)$  に向かって定められたとする．計算セル  $(i, j)$  のスカラー値は 0.6 であるため， $(i+1, j)$  および  $(i, j+1)$  に向かう数値誤差フラックスの初期値はそれぞれ 0.3 で初期化される．一方で， $(i+1, j)$  および  $(i, j+1)$  のセルにおけるスカラーは 0.9 であるため，数値誤差フラックスはそれぞれ 0.1 に修正される．

隣接する計算セル  $\mathbf{a}$ ， $\mathbf{b}$  および  $\mathbf{a}^*$  が式 (2.46) に示される関係にあるとする．

$$\mathbf{b} = \mathbf{a} + \mathbf{s}(\mathbf{a}) = \mathbf{a}^* + \mathbf{s}(\mathbf{a}^*) \quad (2.46)$$

数値誤差フラックスの初期値  $\tilde{q}_k(\mathbf{a})$  を始点となる  $\mathbf{a}$  ではなく  $\mathbf{b}$  を用いて書き直すと式 (2.47) が得られる．ただし，集合  $\mathcal{T}$  は式 (2.48) にて定義される．

$$\tilde{q}^m(\mathbf{b}) \equiv \tilde{q}_k(\mathbf{a}) \quad (m \in \mathcal{T}, \quad k \in \mathcal{S}) \quad (2.47)$$

$$\mathcal{T} = \{j \in \mathcal{N} | j \leq M(\mathbf{b})\} \quad (2.48)$$

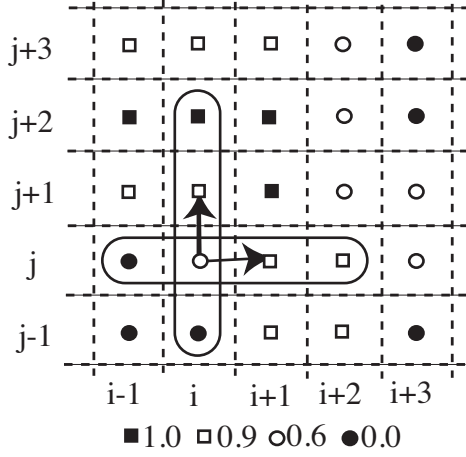


図 2.8: 数値誤差フラックスの初期化

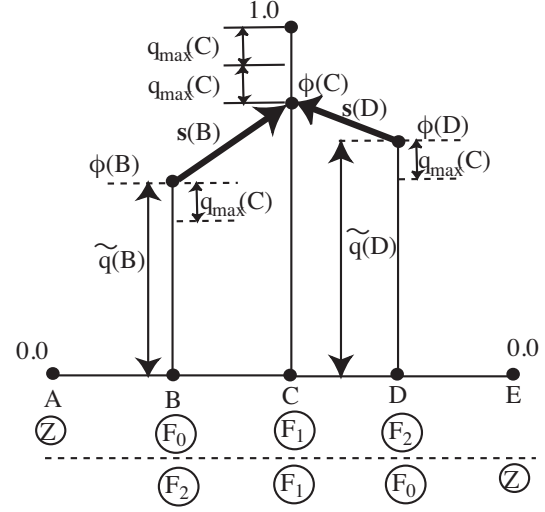


図 2.9: 数値誤差フラックスの修正

$M(\mathbf{b})$  は、計算セル  $\mathbf{b}$  を終点とする数値誤差フラックス方向の総数である。式 (2.47) によって初期化された数値誤差フラックス  $\tilde{q}^m(\mathbf{b})$  は、式 (2.49) によって定義される  $q_{\max}(\mathbf{b})$  によって修正される。

$$q_{\max}(\mathbf{b}) = \min \left[ \min_{m \in T} [\tilde{q}^m(\mathbf{b})], (1 - \phi(\mathbf{b}))/M(\mathbf{b}) \right] \quad (2.49)$$

従って、数値誤差フラックスの方向の始点  $\mathbf{a}$  を用いて修正された数値誤差フラックス  $q(\mathbf{a})$  を表すと式 (2.50) が得られる。

$$q_k(\mathbf{a}) = \min [\tilde{q}_k(\mathbf{a}), q_{\max}(\mathbf{a} + \mathbf{s}_k(\mathbf{a}))] \quad (k \in \mathcal{S}) \quad (2.50)$$

式 (2.50) は、条件  $0 \leq \phi \leq 1$  を満たす数値誤差フラックスを与える。また、式 (2.50) は、1次元移流問題にて導かれた式 (2.31) を多次元に拡張した式とも考えられる。式 (2.51) に示される通り、初期の  $\phi$  は、数値誤差フラックスの方向  $\mathbf{s}(\mathbf{a})$  とその値  $q(\mathbf{a})$  に基づき修正され、 $\phi^*$  となる。

$$\phi^*(\mathbf{a}) = \phi(\mathbf{a}) - \sum_{i=1}^{N(\mathbf{a})} q_i(\mathbf{a}) + \sum_{j=1}^{M(\mathbf{a})} q^j(\mathbf{a}) \quad (2.51)$$

図 2.9 において数値誤差フラックス値  $q$  の評価手順を簡単に示す。図 2.9 には連続する 5 計算セルが示されており、数値誤差フラックスの方向が B から C および D から C に向かって得られている。それぞれの数値誤差フラックス方向に対して、数値誤差フラックス値は

自身の計算セル値である  $\phi(B)$  および  $\phi(D)$  にて初期化される。これらの数値誤差フラックス値は、式 (2.49) によって得られる  $q_{\max}(C)$  によって修正される。図 2.9 の例においては、B から C および D から C に向かう方向に対して数値誤差フラックス値は  $q_{\max}(C)$  に修正され、数値誤差フラックス移流後の計算セル C における値は 1.0 となる。

### 2.2.5 1 次元計算における計算例

本節では、上記のアルゴリズムによる 1 次元の移流計算の計算例を示す。移流スキームとして 1 次風上差分を用い、クーラン数 0.6 にて孤立点の移流計算を行うものとした。図 2.10 に示されるように、初期値において孤立点は Q に位置し、左から右に向かうような流速によって移流する。

1 次風上差分を用いた場合、次時刻の被移流関数  $\phi_i^*$  は、式 (2.52) にて算出される。

$$\phi_i^* = \phi_i - c(\phi_i - \phi_{i-1}) \quad (2.52)$$

ただし、 $c$  はクーラン数である。

図 2.10 において、初期状態① から式 (2.52) を用いて 1 ステップ計算した結果が②である。この被移流関数に対して、AND フィルタの移動ベクトルを定義するプロセスを行うと、Z 点として P 点および S 点が検出されるが、両ケースとも 2 点が 0 であるため移動ベクトルは定義されず、AND フィルタは作用しない。

②に対して式 (2.52) によって移流計算を 1 ステップ進めた結果が③である。この場合、AND フィルタの移動ベクトルは、Q 点から R 点および S 点から R 点に向かう方向に定義される。Q 点から R 点へ向かう移動ベクトルの移動量の初期値は 0.16 であり、S 点から R 点へ向かう移動ベクトルの移動量の初期値は 0.36 である。R 点における受け入れ可能最大量を、式 (2.49) を用いて算出すると、式 (2.53) の通りとなる。

$$r_{\max} = \min(0.16, (1 - 0.48)/2) \quad (2.53)$$

実際の手順においては、R 点への数値誤差修正量が  $r_{\max} = 0.16$  で制限される。以上の手順により AND フィルタによる補正が終了した状態が④である。

以上の手順に従った結果、孤立点の移流計算による数値拡散が 3 セルに広がった場合、AND フィルタによって数値拡散が修正される。また、孤立点の位置がセル中心点間に存在する場合は、両側 2 点のセル中心点の値の重心位置が、理論的な孤立点の位置に相当する。

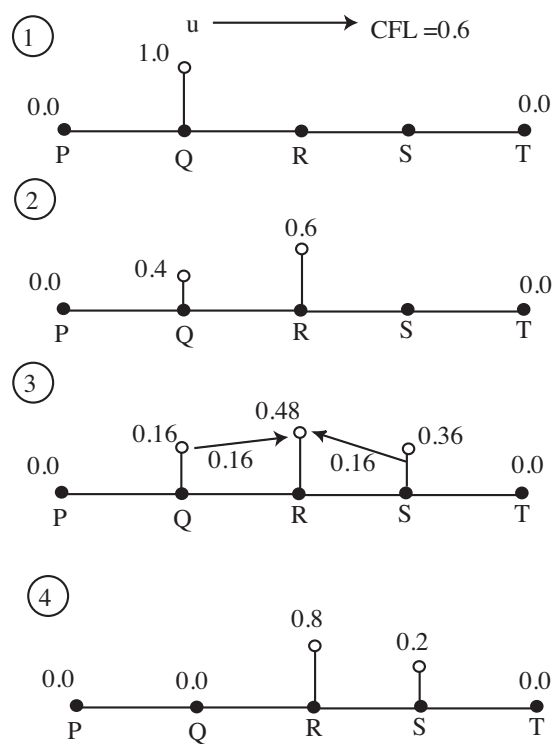


図 2.10: 1 次元移流問題の例

Cell Boundary	(a)		(b)		(b*)		(a*)	
Cell Name	A	B	C	D	E			
Cell Number	i	i+1	i+2	i+3	i+4			
Init. Cell Value	0.0	0.3	0.8	0.3	0.0			
Correction1			$F_2$ ————— $F_1$ ← s(D)		$F_0$ ————— $Z$			
Correction2	$Z$ —————	$F_0$ —————→ $F_1$	$F_2$					
Fin. Cell Value	0.0	0.2	1.0	0.2	0.0			

図 2.11: AND フィルタ並列化に必要なのりしろ (1次元)

### 2.2.6 非数値拡散フィルタの並列化

AND フィルタの並列化については、流体計算の並列化と同様に計算領域の分割に基づく並列化を行うものとした。ただし、領域分割に基づく並列化では、計算領域内の被移流関数の分布によってはプロセス間の計算負荷が不均一となり、並列化効率が落ちる可能性を有していることに注意しなければならない。

以下では、並列化に伴う計算領域の分割の際に、隣接プロセス間でデータを共有が必要な領域について考察する。

前節に述べられた通り、数値誤差フラックス  $q$  を評価するためには、当該計算セルのスカラ値のみならず、フラックス移流先の計算セルに流入する当該計算セル以外からの数値誤差フラックスを考慮する必要がある。図 2.9 には、A,B,C,D,E の連続して隣接する 5 個の計算セルが示されている。数値誤差フラックスの方向がそれぞれ B から C の方向  $s(B)$  と D から C の方向  $s(D)$  へ定義されている。B から C への数値誤差フラックス  $q(B)$  を適切に求めるためには、もう一方の数値誤差フラックス  $q(D)$  を考慮しする必要がある。従って、 $q(B)$  を求めるためには、計算セル A から E までの被移流関数が必要である。

以上の通り、数値誤差フラックスの評価には少なくとも連続する 5 セルの情報が必要である。図 2.11 には、5 セルの境界 (a), (b), (a\*), (b\*) が示されている。

サブドメインの境界がセル境界 (a) であった場合、境界の右側の計算領域で数値誤差フラックス  $q(B)$  を求めるためには左側の計算領域のうち、境界から 1 列分の情報が必要である。サブドメインの境界がセル境界 (b) であった場合、境界の右側の計算領域で数値誤差フラックス  $q(B)$  を求めるためには左側の計算領域のうち、境界から 2 列分の情報が必要である。一方で、境界の左側の計算領域で数値誤差フラックス  $q(B)$  を求めるためには右側の計算領域のうち、境界から 3 列分の情報が必要である。これにより、左側の計算領域でのセル B からの数値誤差フラックスと右側の計算領域のセル C のセル B からの数値



誤差フラックスが一致する。サブドメインの境界がセル境界 ①\* あるいは ②\* であった場合、対称性を利用することで同様の議論が可能である。

従って 1 次元計算領域の場合は、隣接する計算領域同士で隣接部から 3 列分のセル情報を共有しておけば、並列化後も AND フィルタを適切に使用することができる。

計算領域が 2, 3 次元の場合においても、基本的な考え方は 1 次元の場合と同様であるが、**図 2.12** に示されるように隣接部から 4 列分のセル情報が必要となるケースが存在する。

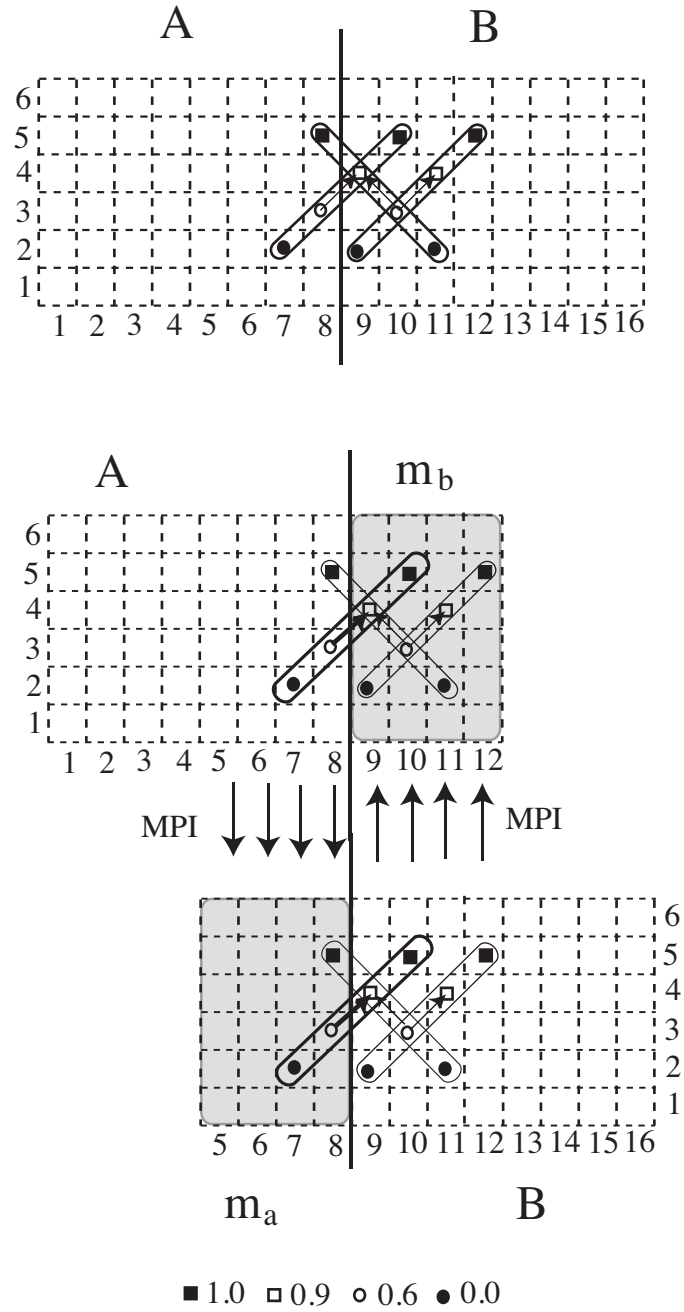


図 2.12: AND フィルタ並列化に必要なのりしろ (2次元)

## 2.3 検証計算

### 2.3.1 1次元波動移流

本節以降では、既往の様々な移流スキームに AND フィルタを作用させ、AND フィルタの効果を検証した。被移流関数として体積占有率を想定し、その代表として階段関数を用いた。階段関数のうち最も厳しい計算条件となるパルス波の移流問題を最初の検証計算例に選定した。計算領域は  $x$  方向に長さ 2 の領域で、初期の状態において、パルス波が  $x = 0.95$  におかれている。

$x$  正方向に 1 の一様な流速場を与え、クーラン数 0.5 の条件で時刻 0.5 まで計算したパルス波の移流計算結果を以下に示す。

以下の表 2.1 に示されるように、検討対象とする移流スキームとして、1 次風上差分、QUICK [5], UTOPIA [6], THINC\WLIC [7, 8], CIP-CSL3 [9], CIP-CSLR0 [10], Lax-Wendroff 法 [11], 高次精度の TVD スキーム [3, 4] を採用した。これらのスキームに対して AND フィルタを作用させ、誤差  $E_{L1}$  および計算に要する CPU 時間を比較した。誤差は式 (2.54) にて定義した。

$$E_{L1} = \frac{\sum_{i,j} |\phi_{i,j}^e - \phi_{i,j}|}{\sum_{i,j} \phi_{i,j}^0} \quad (2.54)$$

ここに、 $\phi^e$  は理論解、 $\phi$  は数値計算によって得られた解、 $\phi^0$  は初期値である。その結果、表 2.1 に示されるようにほぼ全ての移流スキームに対して、誤差を小さくする効果が確認された。また、図 2.13 および 2.14 では初期状態、フィルタ有無による移流計算結果および理論解を移流スキームごとにプロットしている。AND フィルタによって数値拡散が抑制されている様子が明確に確認できる。UTOPIA, Lax-Wendroff 法の例に見られるように、元のスキームにて数値振動が発生する場合においても、それらを抑える効果が確認できる。ただ、位相のずれまでは修正できていないことが示されている。

CPU 時間については、1 次風上差分による計算時間を基準値として相対的な計算時間を示しており、AND フィルタを導入することによって、計算時間が 4 倍から 5 倍に増加していることがわかる。ただ、最終目的とする流体計算に占める移流計算の計算時間の比率は大きくなく、精度の向上を考慮すると十分に実用的なフィルタと考えられる。

### 2.3.2 2次元円盤回転

本節では 2 次元平面における円盤回転問題を扱い、手法の有効性を確かめた。1 次元の移流計算に続き、各手法における移流計算の後、AND フィルタを適用した。1×1m<sup>2</sup> の計算領域内に半径 0.1m の円盤が (0.35, 0.35)m に置かれており、(0.5, 0.5)m を回転の軸とし

表 2.1:  $E_{L1}$  誤差および CPU 時間の比較 (1 次元パルス波移流問題)

Category	$E_{L1}$		CPU time		SUM error(%)	
	original	AND	original	AND	original	AND
1st order upwind	1.5	0.0	1.0	4.58	0.0	0.0
QUICK	3.52	1.87	0.86	4.72	0.0	$-1.66 \times 10^{-8}$
KK scheme	2.33	0.51	1.15	5.48	0.0	$4.87 \times 10^{-8}$
UTOPIA	2.47	1.08	1.25	4.85	$4.26 \times 10^{-14}$	$1.01 \times 10^{-7}$
5th order upwind	6.86	1.46	1.34	6.04	0.0	$1.04 \times 10^{-13}$
THINC\WLIC	0.39	0.0	1.61	5.62	$-1.42 \times 10^{-14}$	0.0
3rd order spline	7.68	1.25	9160	6618	-1.03	$-5.52 \times 10^{-4}$
CIP	0.76	0.31	0.93	4.80	0.0	$-1.34 \times 10^{-6}$
CIP-CSL2	0.81	2.0	1.24	5.23	0.0	$-3.34 \times 10^{-3}$
CIP-CSL3	1.18	1.11	1.64	5.04	$-1.42 \times 10^{-14}$	$-8.56 \times 10^{-7}$
CIP-CSLR0	1.21	0.35	1.28	5.19	0.0	$1.48 \times 10^{-14}$
Lax Wendroff	1.79	1.48	0.91	4.55	0.0	$3.12 \times 10^{-12}$
3rd order TVD	1.23	0.0	1.48	4.66	$-1.42 \times 10^{-14}$	0.0
5th order TVD	1.23	0.0	2.02	5.20	0.0	0.0

て一周回転する．格子分割は  $50 \times 50, 100 \times 100, 200 \times 200$  とした．時間刻みはそれぞれ 0.02s, 0.01s, 0.005s としており， $t = 10$ s で円盤が一周するように速度場を以下の通り定めた．

$$u = -\frac{\pi}{5}(y - 0.5) \quad (2.55)$$

$$v = \frac{\pi}{5}(x - 0.5) \quad (2.56)$$

計算領域内の CFL の最大値は， $\pi\sqrt{2}/10$  となる．誤差  $E_{Lv}$  の評価は，式 (2.57) によって行った．

$$E_{Lv} = \sum_{i,j} \Delta x \Delta y |\phi_{i,j}^e - \phi_{i,j}| \quad (2.57)$$

ここに， $\phi^e$  は理論解， $\phi$  は数値計算によって得られた解， $\Delta x, \Delta y$  はそれぞれの軸方向の格子刻みである．移流スキームとしては，前節の 1 次元移流計算の検証結果を踏まえ，1 次風上差分，THINC\WLIC [7], CIP-CSLR0 [10]，3 次 TVD スキーム [3, 4] を選定した．1 次風上差分および 3 次 TVD スキームに関しては，AND フィルタを作用させたケースも検討したが，THINC\WLIC および CIP-CSLR0 のケースについては，既往手法としての比較対象として検討したため，敢えて AND フィルタを作用しないケースのみを掲載している．表 2.2 に検証計算結果を示す．3 次 TVD スキームおよび 5 次 TVD スキームと AND フィルタを組み合わせたケースにおいては，THINC\WLIC 法による結果と比較し

表 2.2:  $E_{Lv}$  誤差と CPU 時間の比較 (2次元円盤回転問題)

Category Grid spacing	$E_{Lv}$		CPU time		SUM error(%)	
	original	AND	original	AND	original	AND
1st order Upwind						
50 × 50	$5.42 \times 10^{-2}$	$1.12 \times 10^{-2}$	1.0	15.71	$-2.27 \times 10^{-13}$	$-1.90 \times 10^{-14}$
rate	0.43	0.81	2.94	2.95	-	-
100 × 100	$4.01 \times 10^{-2}$	$6.37 \times 10^{-3}$	7.68	121.34	$2.34 \times 10^{-13}$	$-1.80 \times 10^{-14}$
rate	0.44	0.63	3.00	2.99	-	-
200 × 200	$2.95 \times 10^{-2}$	$4.11 \times 10^{-3}$	61.30	964.25	$-7.56 \times 10^{-13}$	$4.43 \times 10^{-10}$
THINC\WLIC						
50 × 50	$5.39 \times 10^{-3}$	-	3.47	-	$1.01 \times 10^{-8}$	-
rate	1.08	-	2.82	-	-	-
100 × 100	$2.55 \times 10^{-3}$	-	24.50	-	$9.45 \times 10^{-10}$	-
rate	0.99	-	2.98	-	-	-
200 × 200	$1.28 \times 10^{-3}$	-	193.8	-	$2.93 \times 10^{-11}$	-
CIP-CSLR0						
50 × 50	$1.28 \times 10^{-2}$	-	4.66	-	$-9.47 \times 10^{-14}$	-
rate	0.77	-	2.99	-	-	-
100 × 100	$7.51 \times 10^{-3}$	-	37.02	-	$-1.98 \times 10^{-13}$	-
rate	0.73	-	3.03	-	-	-
200 × 200	$4.52 \times 10^{-3}$	-	302.82	-	$-1.04 \times 10^{-12}$	-
3rd order TVD						
50 × 50	$1.05 \times 10^{-2}$	$5.49 \times 10^{-3}$	4.89	19.52	$2.65 \times 10^{-13}$	$1.90 \times 10^{-14}$
rate	0.96	1.28	2.99	2.95	-	-
100 × 100	$5.38 \times 10^{-3}$	$2.26 \times 10^{-3}$	38.94	151.30	$9.17 \times 10^{-13}$	$3.60 \times 10^{-14}$
rate	0.58	0.78	3.04	3.00	-	-
200 × 200	$3.59 \times 10^{-3}$	$1.32 \times 10^{-3}$	321.21	1209.45	$1.37 \times 10^{-13}$	$2.16 \times 10^{-13}$
5th order TVD						
50 × 50	$9.57 \times 10^{-3}$	$5.38 \times 10^{-3}$	8.24	22.36	$3.03 \times 10^{-13}$	$-1.90 \times 10^{-14}$
rate	1.01	1.32	3.00	2.96	-	-
100 × 100	$4.76 \times 10^{-3}$	$2.16 \times 10^{-3}$	65.82	174.34	$8.28 \times 10^{-13}$	$5.40 \times 10^{-14}$
rate	0.51	0.72	3.04	3.00	-	-
200 × 200	$3.35 \times 10^{-3}$	$1.31 \times 10^{-3}$	540.67	1395.19	$1.13 \times 10^{-12}$	$1.80 \times 10^{-13}$

**表 2.3:**  $E_{L1}$  誤差と CPU 時間の比較 (2次元 Zalesak 切り欠き円柱回転問題, 一周,  $200 \times 200$ )

Category	$E_{L1}$		CPU time		SUM error(%)	
	original	AND	original	AND	original	AND
1st order Upwind	1.04	$2.11 \times 10^{-1}$	1.0	16.1	$2.18 \times 10^{-13}$	$1.88 \times 10^{-10}$
THINC\WLIC	$4.92 \times 10^{-2}$	-	3.35	-	$1.89 \times 10^{-10}$	-
CIP-CSLR0	$1.83 \times 10^{-1}$	-	5.00	-	$-7.75 \times 10^{-13}$	-
3rd order TVD	$1.66 \times 10^{-1}$	$6.24 \times 10^{-2}$	5.24	20.2	$4.57 \times 10^{-13}$	$-5.96 \times 10^{-14}$
5th order TVD	$1.59 \times 10^{-1}$	$6.20 \times 10^{-2}$	8.84	23.17	$1.23 \times 10^{-12}$	$-1.59 \times 10^{-13}$

て, CPU 時間において 6 倍程度の時間を要しているものの, ほぼ同等の精度が得られていることが確認できる.

スカラー総和の誤差がほとんどないことから, 式 (2.57) により,  $E_{Lv}$  の理論的最大値は,  $0.02\pi$  程度と見積もることができる.

**図 2.15** に理論解および各種スキームにて移流計算後の円盤形状を示す. 3 次 TVD スキームにおいては, AND フィルタを使用したケースと使用しないケースが比較されている. AND フィルタを使用しないケースでは, 部分的な数値不安定性によるものと思われる形状の崩れが見られるが, 時間刻みを  $0.001s$  としたケースではこの形状の乱れが消えることを確認している. 上記の数値不安定性は, 時間方向に 1 次精度として TVD スキームを使用したことによって発生していると考えられる. ただし, 時間方向の精度を他の手法と合わせて比較しやすくするために時間方向に 1 次精度のスキームを利用している. THINC\WLIC 法の結果と比較すると, 若干界面の滑らかさに欠けるが, フィルタの使用によって界面がシャープに保たれるとともに, 上記の数値不安定性による形状の崩れが回避されていることが確認できる.

CIP-CSLR0 においては, 形状保存は良好であるものの初期形状および 3 次 TVD スキームに AND フィルタを適用したケースと比較して数値拡散により界面が広がっていることが確認できる.

### 2.3.3 2次元切り欠け円盤回転

更に, 円盤回転問題のベンチマークよりも厳しい計算条件となる Zalesak の切り欠け円盤の回転問題 [12] を用いて検証計算を行い, 手法の有効性を確かめた. 計算領域は  $1 \times 1m^2$  とし,  $(0.5, 0.75)m$  に半径  $0.15m$  の円盤を配置した. 切り欠けのサイズは幅が直径の  $0.2$

表 2.4:  $E_{L1}$  誤差と CPU 時間の比較 (2次元 Zalesak 切り欠き円柱回転問題, 一周)

Category	Cells	$E_{L1}$		CPU time	
		original	AND	original	AND
1st order upwind	50 × 50	1.51	$4.29 \times 10^{-1}$	1.0	16.3
	rate	0.29	0.25	2.94	2.93
	100 × 100	1.23	$2.49 \times 10^{-1}$	7.68	125
	rate	0.25	0.24	2.99	2.98
	200 × 200	1.04	$2.11 \times 10^{-1}$	61.0	981
THINC\WLIC	50 × 50	$2.20 \times 10^{-1}$	-	3.74	-
	rate	1.20	-	2.88	-
	100 × 100	$9.57 \times 10^{-2}$	-	27.4	-
	rate	1.01	-	3.00	-
	200 × 200	$4.74 \times 10^{-2}$	-	216	-
CIP-CSLR0	50 × 50	$6.41 \times 10^{-1}$	-	4.71	-
	rate	1.02	-	2.99	-
	100 × 100	$3.16 \times 10^{-1}$	-	37.3	-
	rate	0.77	-	3.03	-
	200 × 200	$1.83 \times 10^{-1}$	-	305	-
3rd order TVD	50 × 50	$5.39 \times 10^{-1}$	$2.05 \times 10^{-1}$	4.94	20.5
	rate	1.16	1.10	2.99	2.93
	100 × 100	$2.41 \times 10^{-1}$	$9.50 \times 10^{-2}$	39.4	156
	rate	0.54	0.61	3.02	2.98
	200 × 200	$1.66 \times 10^{-1}$	$6.24 \times 10^{-2}$	320	1230
5th order TVD	50 × 50	$4.89 \times 10^{-1}$	$2.28 \times 10^{-1}$	8.36	23.1
	rate	1.07	1.24	3.00	2.95
	100 × 100	$2.32 \times 10^{-1}$	$9.69 \times 10^{-2}$	66.9	179
	rate	0.54	0.64	3.01	2.98
	200 × 200	$1.59 \times 10^{-1}$	$6.20 \times 10^{-2}$	539	1413

倍, 深さが直径の 0.8 倍である. 格子は  $200 \times 200$  とし, 速度場および時間刻みは前節の円盤回転問題と同様とした. 誤差の評価は式 (2.54) により, 比較検討を行う移流スキームは前節と同様とした.

**表 2.3** に検証計算結果, **図 2.16** に一周移流計算後の切り欠け円盤を示す. 1 次風上差分に AND フィルタを作用させたケースでは界面幅は保たれているが, 形状が大きく崩れている. 3 次および 5 次 TVD スキームにおいては円盤回転の検証計算と同様, 部分的な数値不安定性が出現しているがこの数値不安定性は時間刻みを 0.001s とすれば解消されることを確認している. また, 数値不安定性の出現の原因は前節に述べたとおりと考えられる. THINC\WLIC 法の結果と比較すると界面の滑らかさが若干不足しているが, 3 次 TVD スキームに AND フィルタを作用させたケースでは界面幅が保たれ, 上記の数値不安定性による形状変化が修正されている. CIP-CSLRO 法においては, 数値拡散により界面幅が広がっている.

**表 2.3** に示されるように, 誤差が最も小さいケースは THINC\WLIC であったが, 3 次および 5 次 TVD スキームに AND フィルタを適用したケースでも同オーダーの精度が得られていることが確認された.

### 2.3.4 2次元 Single Vortex

移流スキームの精度検証問題として良く用いられる Single Vortex 問題 [13] によって AND フィルタの効果を検証した.  $1 \times 1\text{m}^2$  の正方形領域を  $200 \times 200$  の計算セルに分割し, 半径 0.15m の円盤を  $(x, y) = (0.5, 0.2 + 0.2/\pi)\text{m}$  に配置した. 計算領域内部の流速場  $(u, v)$  を表す流れ関数  $\Psi$  を式 (2.58) の通りとし, 時刻  $t_{\max} = 10\text{s}$  まで計算した. また, 時間刻みは 0.00125s とした.

$$\Psi = \frac{1}{\pi} \sin(\pi x) \sin(\pi y) \cos(t\pi/t_{\max}) \quad (2.58)$$

流れ場は  $t = 5\text{s}$  にて反転し, せん断流れによって大きく変形した円盤は  $t = 10\text{s}$  にて初期形状を回復する.

**図 2.17** に  $t = 10\text{s}$ , **図 2.18** に  $t = 5\text{s}$  における識別関数の等高線図を示す.

比較対象は, THINC\WLIC, および 3 次 TVD スキームに AND フィルタを適用したケースとした. ただし, 計算に要する CPU 時間の比較のために, 1 次風上差分を用いたケースも同じ計算を行った.

また,  $t = 10\text{s}$  における誤差  $E_{Lv}$  およびそれぞれのケースの計算実行に要した CPU 時間を **表 2.5** に示す. 3 次 TVD スキームに AND フィルタを適用したケースは, 3 次 TVD スキーム単独で用いたケースよりも精度が向上しており, THINC\WLIC と比較しても同



**表 2.5:**  $E_{Lv}$  誤差と CPU 時間の比較 (2次元 Single Vortex 問題,  $200 \times 200$ )

Grid	$E_{Lv}$	CPU time
1st order Up wind	$1.11 \times 10^{-1}$	1.0
THINC \ WLIC	$4.26 \times 10^{-3}$	1.73
3rd order TVD	$5.64 \times 10^{-2}$	2.03
3rd order TVD (AND)	$5.20 \times 10^{-3}$	6.19

オーダーの誤差となっている．一方で，計算に要した CPU 時間を比較すると，AND フィルタを導入することによって計算時間が 3 倍程度に増加していることが確認できる．

### 2.3.5 3次元 Single Vortex

AND フィルタによる移流計算精度を確認するために 3 次元移流計算におけるベンチマーク計算を実施した．また，3 次元ベンチマーク計算は全て並列計算にて実施され，AND フィルタアルゴリズムの並列化効率についても調べた．本研究では，球とスタンフォードバニーの 2 種類の物体形状について 3 次元 Single Vortex 流れ中のせん断変形追跡をベンチマークとした．3 次元 Single Vortex 流れの流速成分  $(u, v, w)$  は次式で与えられる．

$$u = 2 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \quad (2.59)$$

$$v = -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \quad (2.60)$$

$$w = -\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin^2(\pi z) \quad (2.61)$$

3 次元 Single Vortex は， $t = T/2$  において初期配置された物体の最大変形状態を与えるとともに流速場の符号が逆転し，理想的な移流アルゴリズムを採用した場合には  $t = T$  において流れ場に配置された物体の初期形状を回復する．本ベンチマークでは， $t = T$  における物体形状と初期形状との誤差から移流計算の精度を評価する．初期形状として，半径 0.15m の球を  $(0.35, 0.35, 0.35)$ m に配置した．計算領域は， $100 \times 100 \times 100$  および  $200 \times 200 \times 200$  の計算セル分割を利用した．また，並列計算実施のために  $2 \times 2 \times 2$  のサブドメインに分割した．サブドメイン間ののりしろの領域は計算セル 5 列分とした．時間刻みは，計算領域内の最大クーラン数が 0.1 となるように決定した．球に対しては， $T = 2$ s として検証計算を実施した．2 次元移流問題における検証計算結果を参考に，移流スキームとして 5 次 TVD スキームを利用した．球の初期形状と  $t = T$  における形状の差を  $E_{L1}$  にて評価し，移流計算の精度と収束特性を調べた．表 2.7 に示される通り，収束特性は 1.0 以上を示し質量誤差は  $1.0 \times 10^{-7}\%$  程度である．また，スタンフォードバニーに対しても同様の

**表 2.6:**  $E_{L1}$  誤差と CPU 時間の比較 (2次元 Single Vortex 問題,  $T=12s$ ,  $200 \times 200$ )

Category	T	$E_{L1}$		CPU time	
		original	AND	original	AND
1st order upwind	6	1.41	0.68	1.0	5.17
	12	1.56	1.51	1.0	5.38
THINC\WLIC	6	$2.95 \times 10^{-2}$	-	1.65	-
	12	$9.29 \times 10^{-2}$	-	1.79	-
CIP-CSLR0	6	0.37	-	1.78	-
	12	0.91	-	1.81	-
3rd order TVD	6	0.37	$4.61 \times 10^{-2}$	2.09	6.11
	12	1.0	0.14	2.03	6.31
5th order TVD	6	0.23	$4.64 \times 10^{-2}$	3.35	6.73
	12	0.80	0.15	3.14	6.92

流速場を利用して検証計算を行った。スタンフォードバニーのポリゴンデータは次のウェブサイトから入手可能である。(http://www.graphics.stanford.edu/data/3Dscanrep/) このデータは”The Stanford Models”と呼ばれる 3次元物体ポリゴンデータの一つであり、Cyberware 3030 MS によって得られた range data から表面を構成するポリゴンを再構築した ply 形式のデータである。 ”The Stanford Models”の中でも、ウサギの置物のスキャンデータであるスタンフォードバニーは可視化や表面再構築を始め多くの分野で利用されるサンプルデータである。ply 形式のデータをサブセル法によって  $100 \times 100 \times 100$  のボクセルデータに変換し、球と同様に  $2 \times 2 \times 2$  のサブドメイン分割を利用して並列計算を行った。

ply 形式からボクセルデータへの変換方法については、各計算セルの中に  $5 \times 5 \times 5$  のサブセルを準備し、サブセル中心  $Q$  がポリゴン内部にあるかどうかを次式にて得られる指標  $F_i$  にて判定した。

$$F_i = N(L_i(Q), T) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.62)$$

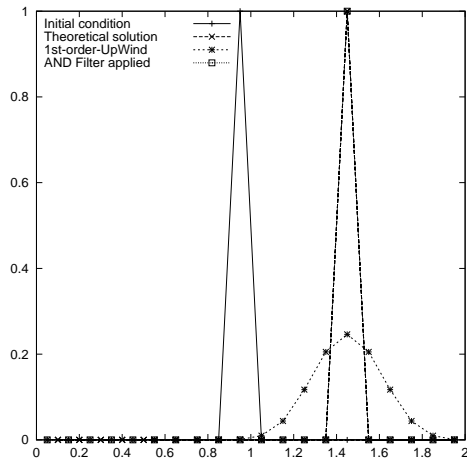
ただし、 $N(L_i(Q), T)$  は、 $Q$  を始点として  $i$  方向へ伸びる線分である  $L_i$  とポリゴンを構成する三角形要素  $T$  の交点の個数である。すべての方向に対して  $F_i$  が奇数であれば当該セル中心はポリゴン内部にあるものとした。図 2.21 にはサブセル中心  $Q$  に対してそれぞれ軸方向に線分  $L_1, L_2, L_3$  が引かれており、それらの線分と三角形要素との交点  $P_i, i = 1 \dots 5$

**表 2.7:**  $E_{L1}$  誤差と質量保存性の比較 (3 次元 Single Vortex, 8 CPUs)

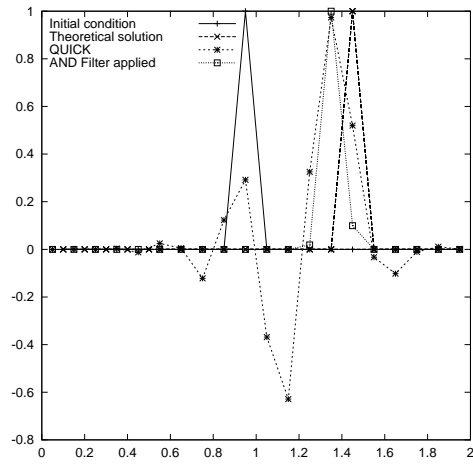
Category	cells	$E_{L1}$	SUM error (%)
Sphere	$100 \times 100 \times 100$	0.35	$4.70 \times 10^{-7}$
	rate	1.13	-
	$200 \times 200 \times 200$	0.16	$3.33 \times 10^{-7}$
Stanford bunny	$100 \times 100 \times 100$	$7.86 \times 10^{-2}$	$6.75 \times 10^{-8}$

が図示されている。3 方向とも奇数個の交点を有するため、点  $Q$  はポリゴン内部と判定できる。ただし、オリジナルのポリゴンデータには穴が開いていたため、適宜ポリゴンを追加して完全な閉空間を構成した。

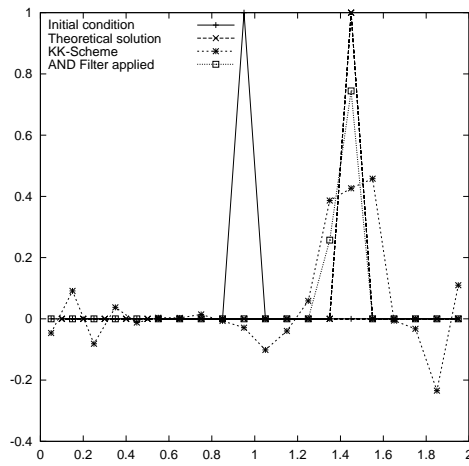
**図 2.23** の左側がスタンフォードバニーの初期形状である。  $t = T/2s$  においてスタンフォードバニーは最大変形状態となるとともに流速場の符号が反転し、  $t = Ts$  においてスタンフォードバニーの初期形状を回復する。本ケースは、  $T = 1s$  として計算を行った。**図 2.23** の中央が  $t = T/2s$  における最大変形状態のスタンフォードバニーで、右側が  $t = Ts$  においてほぼ回復されたスタンフォードバニーの形状である。  $t = T/2s$  において大きく変形した耳の部分等が  $t = Ts$  において回復していることが確認できる。初期形状に対する  $E_{L1}$  誤差を**表 2.7** に示す。優れた質量保存性とともに初期形状との誤差が 0.07 程度となることが確認できる。さらに、スタンフォードバニーのケースにおいては並列計算環境におけるスピードアップを計測した。スピードアップを並列数  $N$  に対してプロットした図が**図 2.24** である。スピードアップは、  $N < 8$  の領域では線形特性を示すが、  $N$  が増えるに従い通信負荷が相対的に増えるため徐々に並列化効率が下がり、  $N = 64$  では理論値に対して 50% のスピードアップ値となった。また、並列化効率低下の原因として AND フィルタによる修正を必要とする計算セルはスタンフォードバニーの界面付近に集中するため、プロセス間での負荷バランスが崩れていることも考えられる。



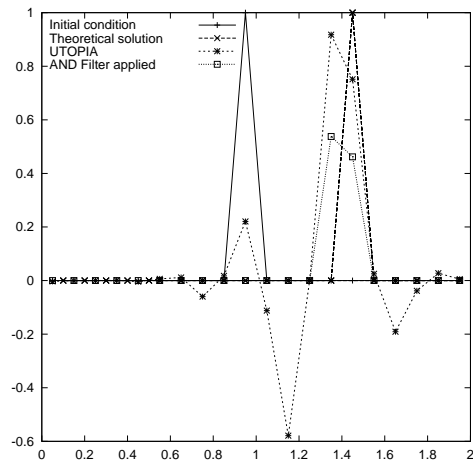
(1st order upwind)



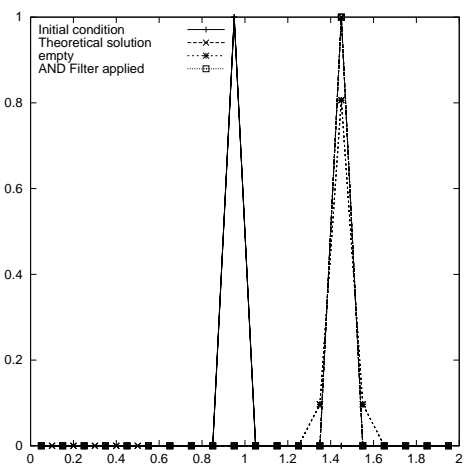
(QUICK)



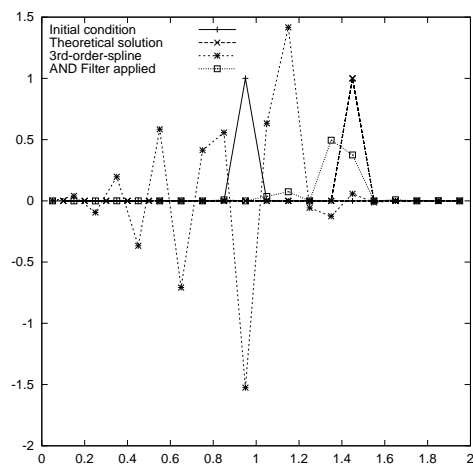
(KK scheme)



(UTOPIA)



(THINC\WLIC)



(3rd order spline)

図 2.13: パルス波の 1 次元移流問題 (1)

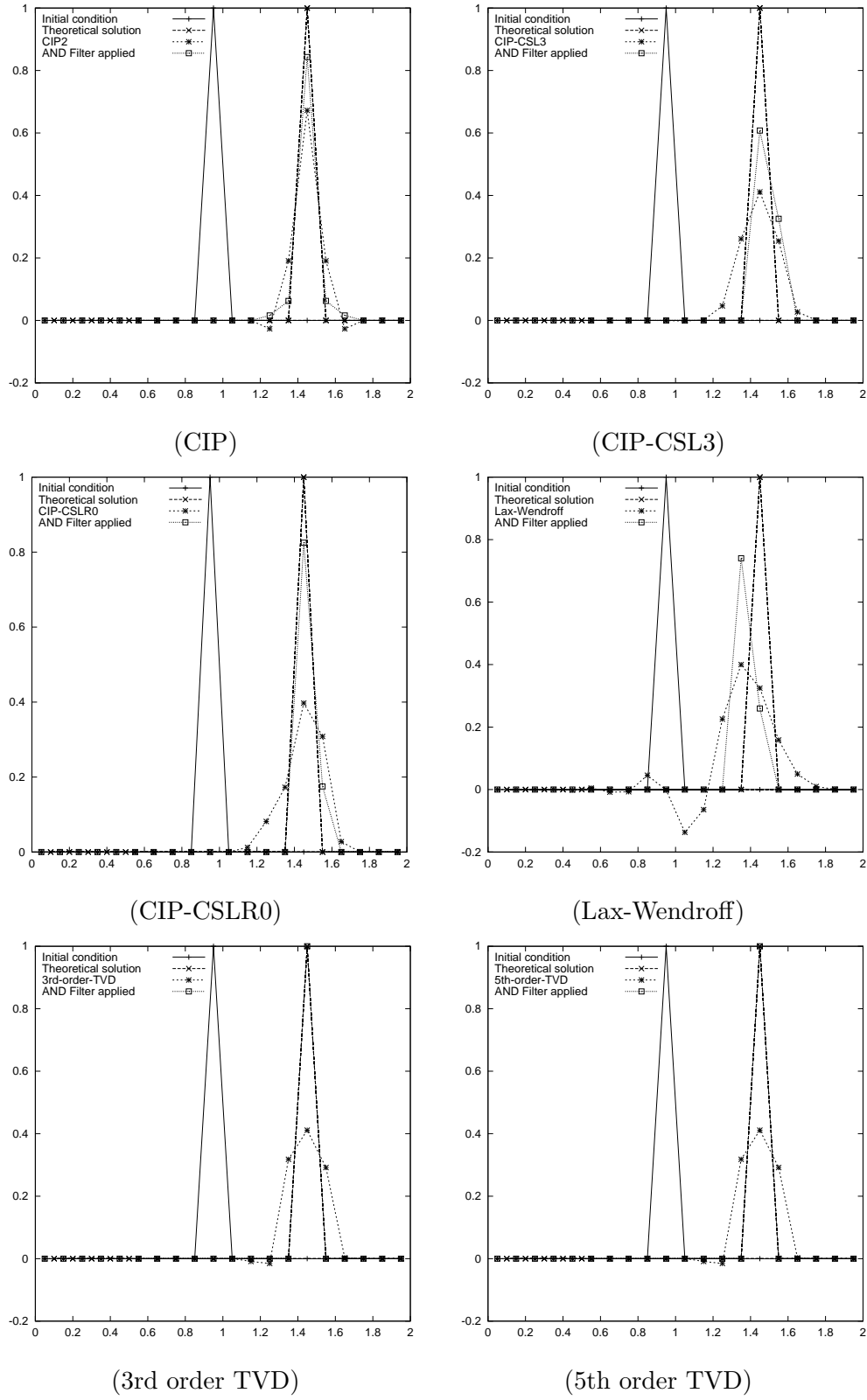
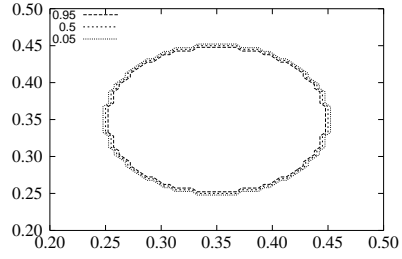
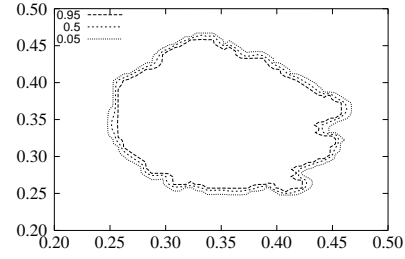


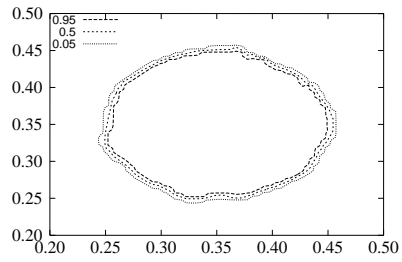
図 2.14: パルス波の 1 次元移流問題 (2)



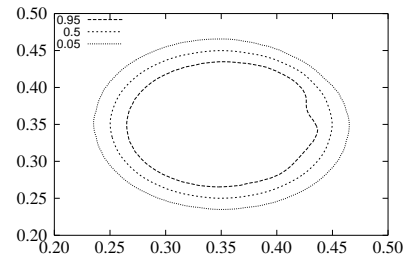
(Initial Condition)



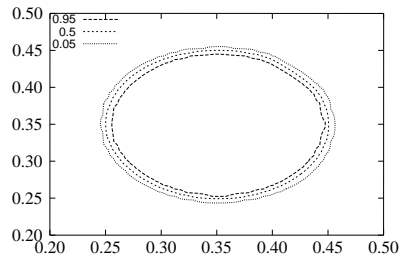
(1st order Up Wind + AND Filter)



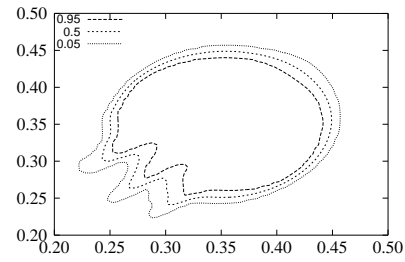
(3rd order TVD + AND Filter)



(CIP-CSLR0)

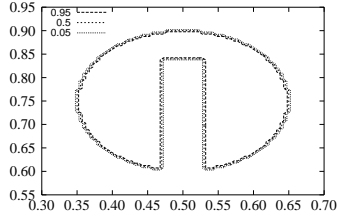


(THINC\WLIC)

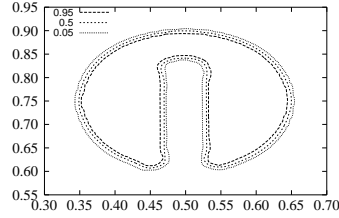


(3rd order TVD)

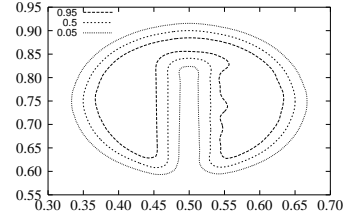
図 2.15: 2次元円盤回転問題 (200×200)



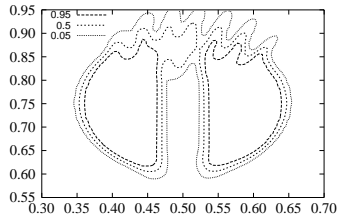
(Initial Condition)



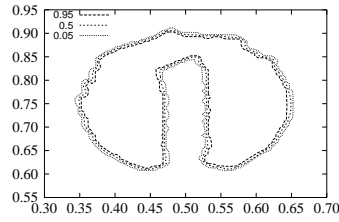
(THINC\WLIC)



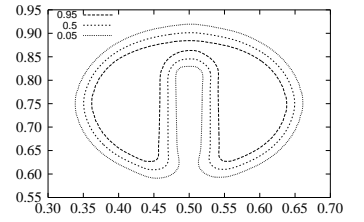
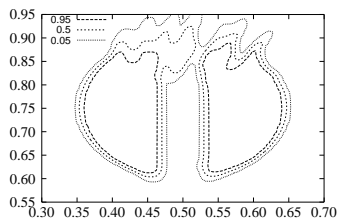
(CIP-CSLR0)



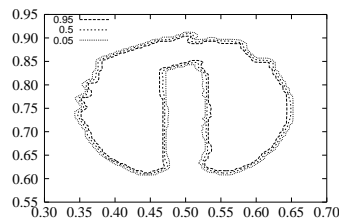
(3rd order TVD)



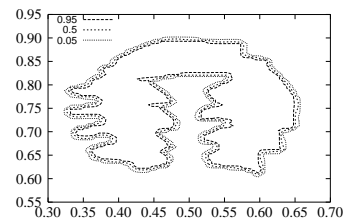
(3rd order TVD + AND Filter)

(3rd order TVD  $\Delta t = 0.001$ )

(5th order TVD)

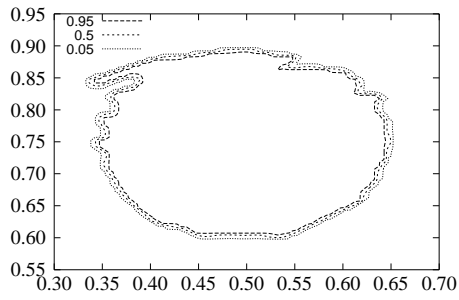


(5th order TVD + AND Filter)

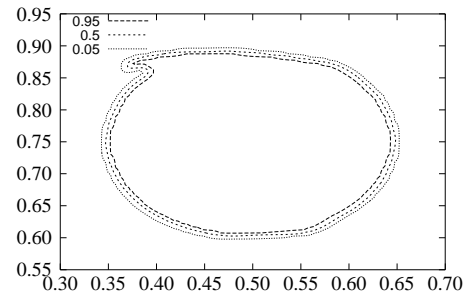


(1st order upwind + AND Filter)

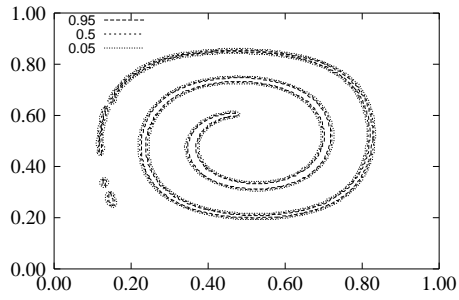
図 2.16: 2次元 Zalesak 切り欠き円柱回転問題 (200×200)



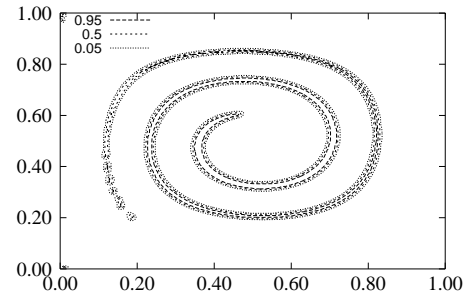
(3rd order TVD + AND)



(THINC\WLIC)

図 2.17: 2次元 Single Vortex 問題 ( $t=10s$ )

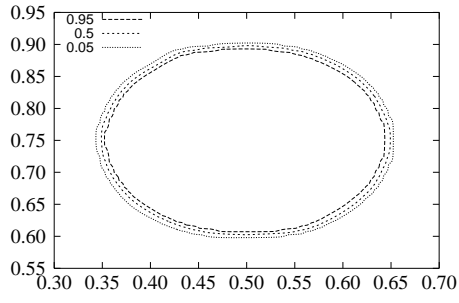
(3rd order TVD + AND)



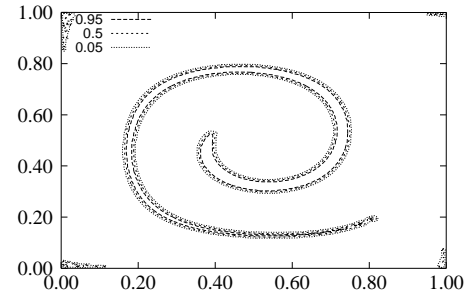
(THINC\WLIC)

図 2.18: 2次元 Single Vortex 問題 ( $t=5s$ )

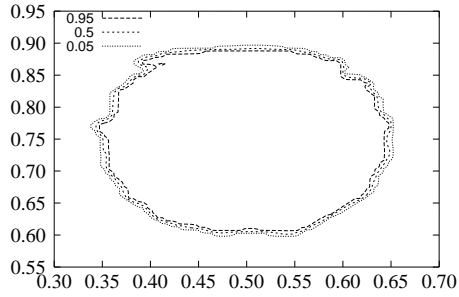




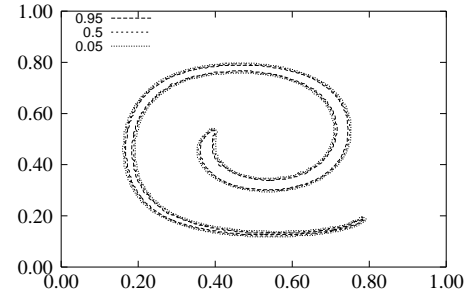
(THINC\WLIC)

 $(T = 6, t = 6)$ 

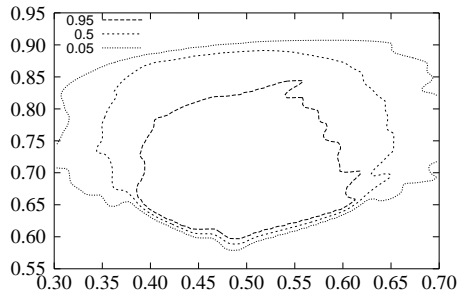
(THINC\WLIC)

 $(T = 6, t = 3)$ 

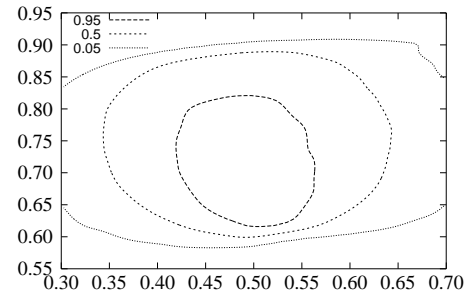
(5th order TVD + AND)

 $(T = 6, t = 6)$ 

(5th order TVD + AND)

 $(T = 6, t = 3)$ 

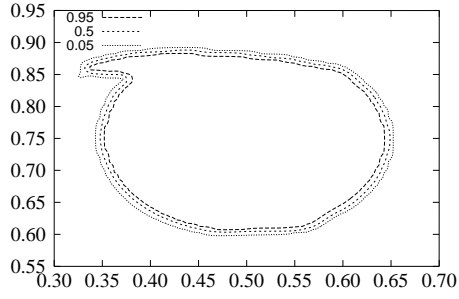
(5th order TVD)

 $(T = 6, t = 6)$ 

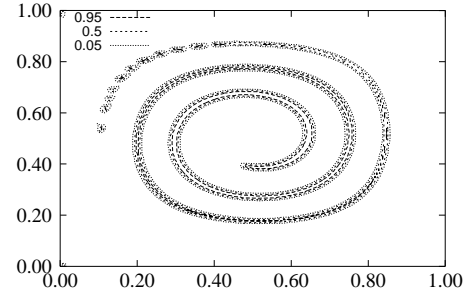
(CIP-CSLR0)

 $(T = 6, t = 6)$ 

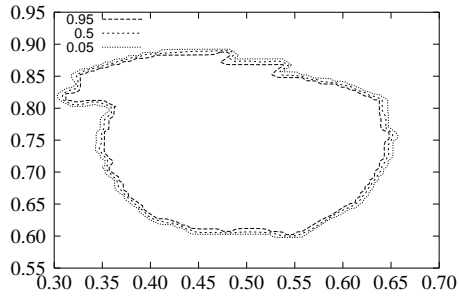
図 2.19: 2次元 Single Vortex 問題 ( $T=6s, 200 \times 200$ )



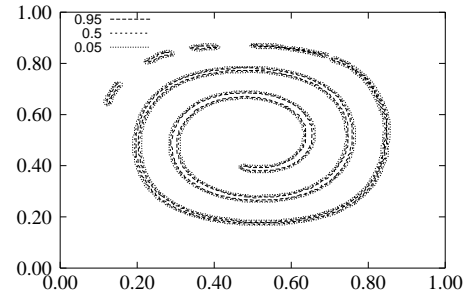
(THINC\WLIC)  
( $T = 12, t = 12$ )



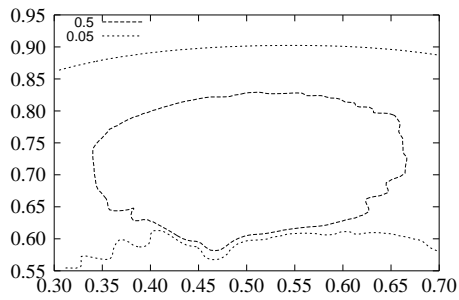
(THINC\WLIC)  
( $T = 12, t = 6$ )



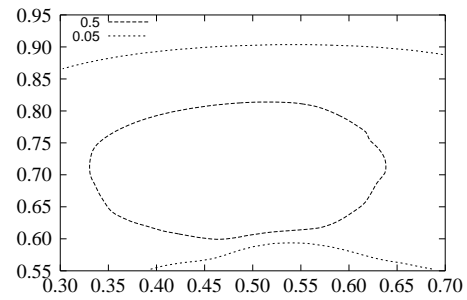
(5th order TVD + AND)  
( $T = 12, t = 12$ )



(5th order TVD + AND)  
( $T = 12, t = 6$ )



(5th order TVD)  
( $T = 12, t = 12$ )



(CIP-CSLR0)  
( $T = 12, t = 12$ )

図 2.20: 2次元 Single Vortex 問題 ( $T=12s, 200 \times 200$ )

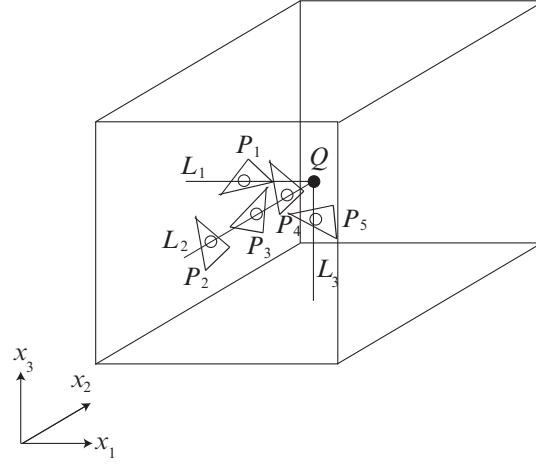
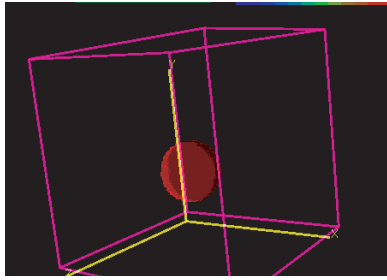
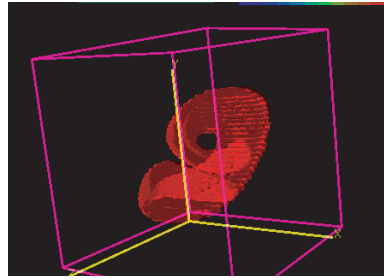
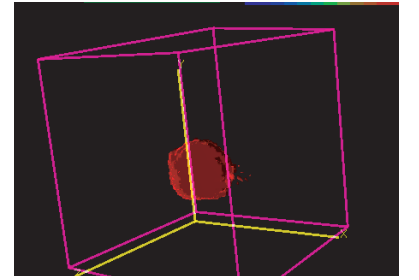
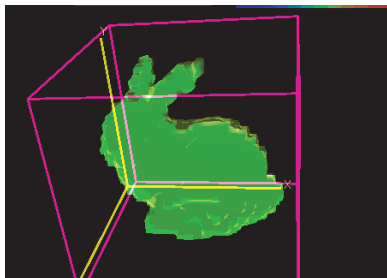
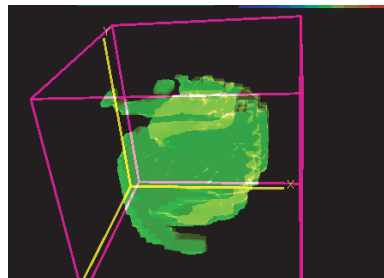
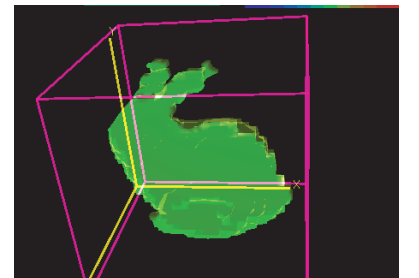


図 2.21: 任意形状ポリゴンに対するサブセル法

(Initial Condition  $t = 0.0s$ )(Deformed Sphere  $t = 0.5s$ )(Recovered Sphere  $t = 1.0s$ )図 2.22: 3次元 Single Vortex(球,  $200 \times 200 \times 200$ )(Initial Condition  $t = 0.0s$ )(Deformed Bunny  $t = 0.5s$ )(Recovered Bunny  $t = 1.0s$ )図 2.23: 3次元 Single Vortex (Stanford bunny,  $100 \times 100 \times 100$ )

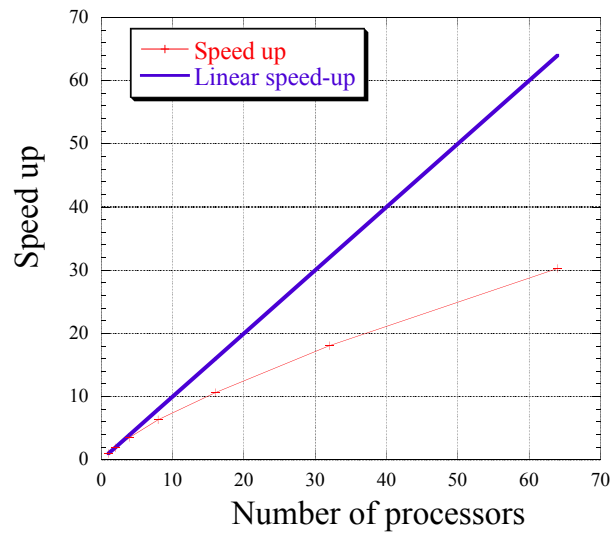


図 2.24: 並列数に対するスピードアップ (3次元 Single Vortex, Stanford bunny,  $100 \times 100 \times 100$ )

## 2.4 章のまとめ

本章では、大きな界面形状変化を伴う気液混相流数値計算における界面捕捉の精度を向上させることを目的として、移流計算後に適用する非数値拡散フィルタ (AND フィルタ) を提案し、その有効性を 1 次元、2 次元および 3 次元の検証計算を通して検証した。AND フィルタはそのアルゴリズム上、以下に示す利点を持ち合わせている。

1. 被移流関数の値を常に 0 と 1 の間に保ち、安定した計算が持続可能である。
2. 数値拡散を修正しながら時間発展するため、界面厚さを一定に保つことができる。
3. 被移流関数のみを使用して代数計算により修正値を求めるため、コンパクトなアルゴリズムであり、導入が容易である。

検証計算では、特に高次 TVD スキームと AND フィルタの組み合わせによる結果が精度の高い計算結果を与えた。現在、VOF 法の移流スキームとして良く用いられる THINC\WLIC 法と比較して、界面の滑らかさにおいて若干劣るものの、同オーダーの精度を得ることができた。また、提案手法の並列計算手法についても検討した。並列化については適用問題によって負荷バランスが崩れる可能性を有しているが、常に負荷バランスを取るようなアルゴリズムについては、今後の課題である。また、アルゴリズムの効率化によるフィルタ処理の高速化 および非構造格子への拡張等が更なる検討課題として挙げられる。

## 参考文献

- [1] 梶島岳夫. 乱流の数値シミュレーション, 第 2 章. 養賢堂, 2007.
- [2] 肖鋒, 伊井仁志, 小野寺直幸. 計算流体力学 CIP マルチモーメント法による手法, pp. 61–93, 182–185. コロナ社, 2009.
- [3] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, Vol. 49, No. 3, pp. 357–393, 1983.
- [4] Hirsh C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley & Sons, 1990.
- [5] Leonard B.P. The QUICK Algorithm : A Uniformly Third-Order Finite-Difference Methods for Highly Convective Flows. *Computer Methods in Fluids*, pp. 159–195, 1980. Pentech Press.

- [6] Leonard B.P. A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 19, pp. 59–98, 4 1979.
- [7] Yokoi K. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. *J. Comput. Phys.*, Vol. 226, pp. 1985–2002, 2007.
- [8] Xiao F., Honma Y., and Kono T. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 48, pp. 1023–1040, 2005.
- [9] F. Xiao and T. Yabe. Completely conservative and oscillationless semi-Lagrangian schemes for advection transportation. *J. Comput. Phys.*, Vol. 170, p. 498, 2001.
- [10] F. Xiao, X. Peng, T. Yabe, and H.Kobayashi. Conservative and oscillation-less atmospheric transport schemes based on rational functions. *J. Geophysical Research-Aomosphere*, Vol. 107, No. D22, 11 2002. Art. No. 4609.
- [11] Lax P.D. and Wendroff B. Systems of conservation laws. *Commun. Pure Appl. Math.*, Vol. 13, pp. 217–237, 1960.
- [12] Zalesak S.T. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, Vol. 31, pp. 335–362, 1979.
- [13] Rudman M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations,. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 24, pp. 671–691, 1997.

## 第3章 界面の平面近似を用いた高精度界面捕捉法

### 3.1 研究の背景

気液混相流れ数値解析においては気液界面形状を各流体の体積占有率を識別関数として利用し，界面形状を高精度に表現する手法が課題となってきた．計算セルに与えられた体積占有率から界面形状を推定する初期の手法としてはSLIC(Simple Linear Interface Calculation) [1] が挙げられる．SLICにおいては，界面の法線方向は座標軸に平行な方向に限られていたため，形状表現能力に課題を有していたが，SLIC法を発展させた手法として推定界面の法線方向を任意の方向として取り扱えるPLIC法 [2–5] が界面の時間変化を追跡する一つの手法として精力的に研究が進められている．例えば最近では，平面の傾きと周囲計算セルにおける体積占有率とのバランスを考慮することによって形状表現能力を高める手法 [6] や，計算セル内の界面形状を2次多項式 [7, 8] や，ベジェ曲面 [9] で表現する手法，あるいは距離関数を用いる手法 [10] 等に関する多くの研究がなされている．また，2次元ではあるが単一計算セルにおける複数の境界面の取り扱いも検討されている [11]．

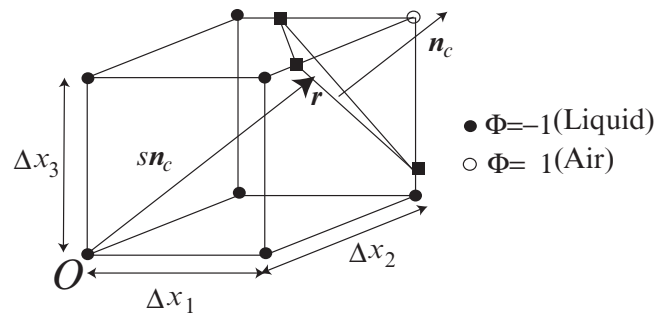


図 3.1: 計算セル体積と切断平面の位置関係

3次元PLICは，計算セルにおける体積占有率と法線ベクトルから計算セル内における界面を表現する平面を推定する手法であり，高精度である反面，推定平面と計算セル体積の位置関係によって場合分けが生じるため，推定手法が煩雑になる．そこで，本研究では推定平面と計算セル体積の位置関係によらない統一的なアルゴリズムを用いて推定平面を

求める手法について検討した。

## 3.2 界面捕捉のアルゴリズム

### 3.2.1 概要

まず，提案手法アルゴリズムの概要について述べる．PLIC によるフラックス評価の手順は図 3.2 に示される。

まず，各計算セルにおいて隣接計算セルの識別関数の値などから界面法線ベクトルの評価を行う．続いて，界面を近似する平面を推定する．推定平面によって切り取られる計算セル断片の体積との体積占有率の整合性を確かめ，誤差がしきい値以上である場合には，推定平面位置を微修正し，推定平面によって切り取られる計算セル断片を再度求め，体積占有率と比較した相対誤差がしきい値以下になるまで推定平面位置の微修正を繰り返す．推定平面位置が決定された後は，各セル境界における移流体積が平面によって切り取られる断片の体積を求め，移流フラックスとする．各セル境界にて移流フラックスが求められた後，識別関数の時間更新を行う．以上が，提案アルゴリズムの概要である。

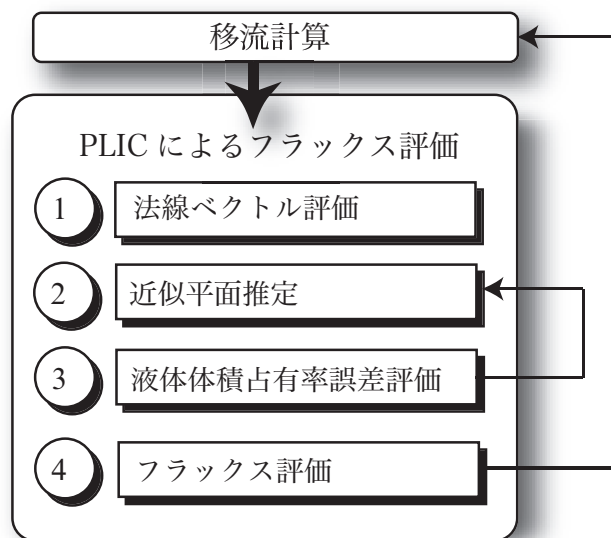


図 3.2: PLIC を用いたフラックス評価手順



### 3.2.2 セル中心における法線ベクトルの評価

本節では法線ベクトルの評価法について述べる。法線ベクトル評価方法は、既往研究 [2–4] 等に多数提案されているが、これらを含めての詳細な検討は本研究では行わず、簡易的に以下の方法を用いた。

法線ベクトルは計算セル内における界面の法線ベクトル  $\mathbf{n}_c$  を流体体積率  $\phi$  の局所勾配方向から求めた。

$$\mathbf{n}_c = \nabla \phi \quad (3.1)$$

ただし、本研究においては簡易的に局所勾配を式 (3.2) の通りに離散化し、周囲の計算セルにおける法線ベクトル方向と極端に異なる法線ベクトル分布とならないように隣接セルも含めた勾配に重み  $w_a, w_b$  をつけて法線ベクトルを求めた。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha i,j,k}} &\approx \frac{1}{|w_a + 4w_b|} \left[ w_a \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha},j+\delta_{2\alpha},k+\delta_{3\alpha}} - \phi_{i-\delta_{1\alpha},j-\delta_{2\alpha},k-\delta_{3\alpha}}}{2\Delta x_{\alpha}} \right. \\ &+ w_b \sum_{\substack{\beta=1,2,3 \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha}+\delta_{1\beta},j+\delta_{2\alpha}+\delta_{2\beta},k+\delta_{3\alpha}+\delta_{3\beta}} - \phi_{i-\delta_{1\alpha}+\delta_{1\beta},j-\delta_{2\alpha}+\delta_{2\beta},k-\delta_{3\alpha}+\delta_{3\beta}}}{2\Delta x_{\alpha}} \\ &\left. + w_b \sum_{\substack{\beta=1,2,3 \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j+\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k+\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}} - \phi_{i-\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j-\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k-\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}}}{2\Delta x_{\alpha}} \right] \quad (3.2) \end{aligned}$$

ただし、 $\alpha = 1, 2, 3$  である。また、 $\delta_{ij}$  はクロネッカーのデルタである。

### 3.2.3 収束計算を伴う界面形状推定法

本節においては、識別関数の局所分布から求められる法線ベクトルと計算セルに定義された体積占有率から界面形状を推定する。図 3.1 に示されるように計算セルの原点  $\mathbf{O}$  は、法線ベクトル  $\mathbf{n}$  の各成分の符号によって六面体の頂点から選ぶこととする。計算セルの原点  $\mathbf{O}$  は、式 (3.3) に示される。

$$O_{\alpha} = \max(0, -\text{sgn}(n_{\alpha}))\Delta x_{\alpha} \quad (3.3)$$

ただし、計算セル頂点の座標は  $x_1, x_2, x_3$  成分がそれぞれ最小となる座標をもつ頂点を基準に相対座標で表現されているものとする。

$\Delta \mathbf{x} = (\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$  は直方体計算セルの各辺の長さである。推定平面の傾きは法線ベクトル  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  で与えられるため、推定平面の位置を体積占有率と整合がとれるように調整することが必要である。図 3.1 に示されるように切断平面が点  $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)$  を通るならば切断平面の式は以下で与えられる。

$$0 = n_1(x_1 - r_1) + n_2(x_2 - r_2) + n_3(x_3 - r_3) \quad (3.4)$$

また、計算セルの頂点  $K$  を一つ選び、その座標を  $\mathbf{K}$  とすると、推定平面の位置を決める点  $\mathbf{r}$  は、ある定数  $s$  を用いて以下の通りに表される。

$$\mathbf{r} = \mathbf{K} + s \mathbf{n} \quad (3.5)$$

一方で、平面位置  $\mathbf{r}$  と法線ベクトル  $\mathbf{n}$  が与えられた場合、平面によって切り取られる計算セル体積は後に述べられる手順によって求められる。この手順により、原点  $O$  を含む体積断片  $V_0$  は、未知定数  $s$  の関数として、式 (3.6) で表される。

$$V_0 = f(s, \mathbf{n}, \Delta \mathbf{x}) \quad (3.6)$$

$\mathbf{n} = (1, 1, 1)$  の場合、式 (3.6) に基づき  $V_0$  と  $s$  の関係を表した図が図 3.3 である。本来であれば、与えられた  $V_0$  から  $s$  が直接求められることが望ましいが、本研究においては、ニュートン法を用いて  $V_0 = \phi$  を満たす  $s$  を求める。ニュートン法の適用にあたっては、以下の漸化式によって次ステップの  $s$  を求め、体積断片  $V_0$  が与えられた体積率  $\phi$  と許容誤差内で一致するまで繰り返し計算を行う。本研究で用いた収束条件は、体積占有率の相対誤差  $E = |\phi - V_0|/\phi$  が  $1.0 \times 10^{-5}$  を下回るものとした。

$$\Delta s^m = \frac{\phi - f^m(s^m)}{f_s^m} \quad (3.7)$$

$$s^{m+1} = s^m + \Delta s^m \quad (3.8)$$

ここで、 $f_s^m$  は反復計算  $m$  ステップ目における  $f$  の  $s$  による一次微分項であるが、数式で求めるのは煩雑であるため、次式にて近似した。

$$f_s^m \approx \frac{f^m - f^{m-1}}{s^m - s^{m-1}} \quad (3.9)$$

また、後に示される通り  $f(s)$  の初期値  $f^0$  の精度が高ければ、少ない繰り返し計算回数で収束する。

文献 [3] による 3 次元 PLIC においても、体積占有率から切断平面位置を決定するためには高々 3 次の代数方程式を反復解法にて解く必要がある。また、適切な実数解を得るためには反復解法に対する適切な初期値を設定する必要がある。本研究における反復解法による切断平面位置の決定という問題は図 3.3 における縦軸の体積占有率  $\phi$  から横軸の  $s$  を求める問題である。元々のアルゴリズムと本質は同様であり、高々 3 次の代数方程式のニュートン法による求解と解釈できる。したがって、本アルゴリズムにおいても初期値推定の精度が収束性に影響すると考えられる。次節にて議論する適切な初期値の推定についてはこのような背景によるものであり、解の収束性を確保するという点で重要である。

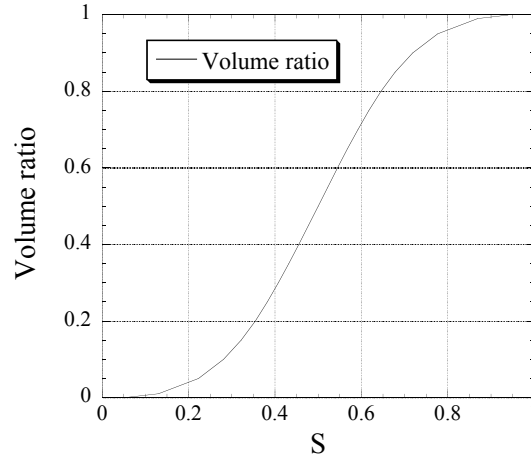


図 3.3:  $s$  と体積断片体積の関係 ( $\mathbf{n} = (1, 1, 1)$ )

### 3.2.4 切断平面の初期推定

本節では、反復解法に与える初期切断平面の求め方について述べる。初期状態として、法線ベクトル  $\mathbf{n}$  と計算セルの各辺の長さ  $\Delta x_\alpha, \alpha = 1, 2, 3$  および、計算セルの原点と平面上の一点の相対位置関係を表すベクトル  $\mathbf{r}$  が与えられる。

計算セル原点座標から切断平面までの距離を表現する相対位置ベクトル  $\mathbf{r}$  を次式で求め、切断平面の初期値とする。

$$\mathbf{r} = \mathbf{O} + s \mathbf{n} \quad (3.10)$$

未知定数  $s$  については、与えられた体積占有率  $\phi$  の値と法線ベクトル  $\mathbf{n}$  の各成分の値および計算セル幅の関係から求める。 $s$  を体積占有率と計算セル原点から切断平面までの距離の関係性を推定する成分  $s^*$  と、 $s$  の絶対値を調整する成分  $\hat{s}$  に分けて  $s = s^* \hat{s}$  として求める。ただし、 $s^*, \hat{s}$  はそれぞれ式 (3.11)、式 (3.12) にて求める。本研究では試行錯誤の上式 (3.11) を用いたが、多数の代替案が考えられる。

$$s^* = \begin{cases} 0.9\phi & z(\mathbf{n}) = 2 \\ 0.9\phi^{1/2} & z(\mathbf{n}) = 1 \\ 0.9\phi^{1/3} & z(\mathbf{n}) = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

ただし、 $z(\mathbf{a})$  はベクトル  $\mathbf{a}$  の成分のうち値が 0 である成分の数である。

$$\hat{s} = \frac{\Delta x_\beta}{|n_\beta|} \text{ where } |n_\beta| = \max_{\alpha=1,2,3} |n_\alpha| \quad (3.12)$$

式 (3.12) において  $\beta$  は 1, 2, 3 のいずれかである. このとき, 初期推定の切断平面は式 (3.10) および式 (3.4) を用いて求められる.

### 3.2.5 体積断片の求積

本節では, 与えられた切断平面が切り取る計算セル体積の求積方法について述べる. まず, 計算セルの各辺と切断平面の交点位置を求める. このとき, 6 面体を構成する 12 辺を各座標軸方向の 4 本ずつのグループ  $L_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) に分類し, グループ毎に切断平面との交点を求めるものとする. 辺のグループ  $L^\alpha$  と各辺の原点側の座標  $p_{i,j}^\alpha$  ( $i = 1, 2; j = 1, 2$ )

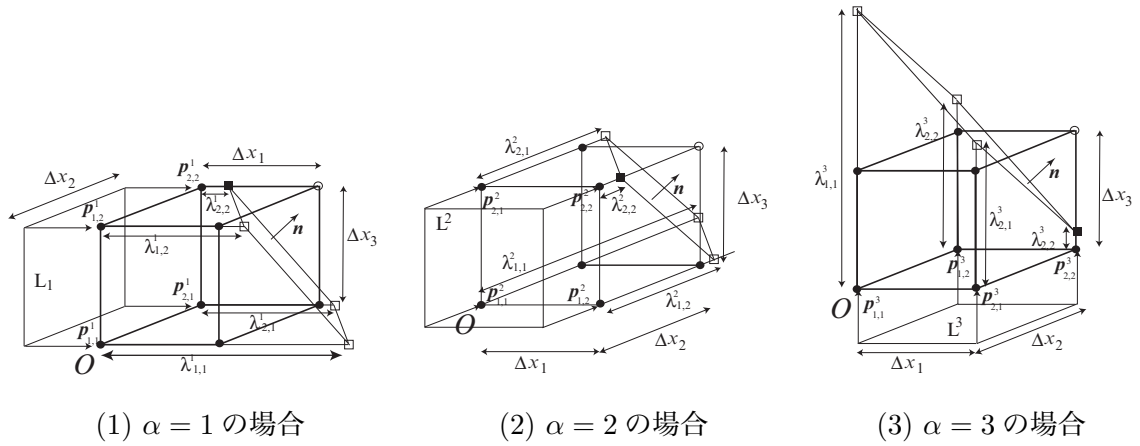


図 3.4: 計算セル体積辺グループ  $L^\alpha$  と各辺の原点側座標  $p_{i,j}^\alpha$  の関係

の関係は図 3.4 に示される. ただし,  $i, j$  の整数の組み合わせはグループ  $L^\alpha$  内に含まれる 4 辺を識別するためのインデックスである. 辺方向の計算セルサイズおよび平面の式を決める二つのベクトル  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{r}$  から各辺の交点座標  $\lambda_{i,j}^\alpha$  を次式で求める.

$$\lambda_{i,j}^\alpha = r_{\sigma_\alpha(1)} - (n_{\sigma_\alpha(2)}(p_{i,j,\sigma_\alpha(2)}^\alpha - r_{\sigma_\alpha(2)}) + n_{\sigma_\alpha(3)}(p_{i,j,\sigma_\alpha(3)}^\alpha - r_{\sigma_\alpha(3)})) / n_{\sigma_\alpha(1)}$$

where  $n_{\sigma_\alpha(1)} \neq 0$

(3.13)

ここに,  $\sigma_\alpha \in S_3$  は 3 次の巡回置換であり, 次式に示す通りである.

$$\sigma_1(1) = 1, \sigma_1(2) = 2, \sigma_1(3) = 3 \quad (3.14)$$

$$\sigma_2(1) = 2, \sigma_2(2) = 3, \sigma_2(3) = 1 \quad (3.15)$$

$$\sigma_3(1) = 3, \sigma_3(2) = 1, \sigma_3(3) = 2 \quad (3.16)$$

各交点座標が,  $0 < \lambda_{i,j}^\alpha < \Delta x_\alpha$  を満たす場合に, 交点  $P_S$  の数として計上する. この作業をそれぞれのグループ  $L^\alpha$  について実行する. したがって, 体積断片を構成する頂点  $P_S$  の

部分集合  $\mathcal{T}_S \subset \mathcal{T}$  が得られる。ただし、 $\mathcal{T}$  は体積断片を構成する頂点全体の集合である。このとき、切断平面と辺の交点の数は、 $n(\mathcal{T}_S)$  によって得られる。次に、計算セル頂点の取り扱いを行う。頂点の座標は既知であるため、**図 3.1** に示されるように全ての頂点に対して次式に示す識別子  $\Phi$  を配置し、各頂点が原点に対して切断平面の内側か外側かあるいは切断平面上かを判断する。

$$\Phi(\mathbf{P}_{Vi}) = \text{sgn} \left[ \sum_{\alpha=1,2,3} n_{\alpha}(p_{Vi\alpha} - r_{\alpha}) \right] \quad (3.17)$$

ただし、 $p_{Vi\alpha}$  は点  $P_{Vi}$  の座標成分であり、 $i$  は頂点の識別番号である。識別子  $\Phi$  の値が 0 あるいは原点の  $\Phi$  の値と同じである頂点  $P$  をまとめ、体積片を構成する頂点の部分集合  $\mathcal{T}_v \subset \mathcal{T}$  を定義する。

$$\mathcal{T}_v = \{P_{Vi} | \Phi_i = (\Phi(\mathbf{O}) \cup 0)\} \quad (3.18)$$

この部分集合の要素の和  $n(\mathcal{T}_v)$  が 8 である場合には、切断平面に対して全ての頂点が同じ側に存在することになるため、切断平面と計算セル体積が接触しないと判断する。切断平面が計算セル頂点を通る場合に頂点座標の重複計上を避けるために、部分集合  $\mathcal{T}_S$  には計算セル頂点を含めないものとした。このため、体積断片を構成する座標の集合  $\mathcal{T}$  は  $\mathcal{T}_v$  と  $\mathcal{T}_S$  の直和で求められる。

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_v + \mathcal{T}_S \quad (3.19)$$

**図 3.5** には、 $\mathcal{T}_v$  に含まれる頂点  $P_v$  及び  $\mathcal{T}_S$  に含まれる交点  $P_s$  の例が示されている。

体積断片が凸多面体であることを仮定すれば、体積断片内に適当な一点をとることで体積断片を四面体の集合体に分割することができる。ここでは、頂点座標  $\hat{\mathbf{p}} \in \mathcal{T}$  から求められる重心  $G$  を用いて体積断片を四面体の集合に分割する。重心  $G$  の座標は頂点座標の単純平均にて求めた。

体積断片は、 $G$  を頂点として含み、残りの 3 点は直方体の 6 面あるいは切断面上に存在するような四面体に分割することとした。分割した四面体の集合を  $\mathcal{U}$  とすると、頂点  $G$  を除く 3 点が共有する面によって部分集合を作ることが可能であり、 $\mathcal{U}^i \in \mathcal{U}$ , ( $i = 1, \dots, 7$ ) とできる。ここに、 $i$  は面につけられた番号であり、1 から 6 はセル体積である 6 面体のそれぞれの面を示し、7 は切断面を示す。各部分集合  $\mathcal{U}^i$  に含まれる四面体  $\hat{t}$  の頂点は  $\mathcal{T}$  の要素および  $G$  の中から選ばれる。次式に示される部分集合  $\mathcal{T}^i$  は、部分集合  $\mathcal{U}^i$  の要素の四面体の頂点の集合である。

$$\mathcal{T}^i = \{ \hat{\mathbf{p}} \in \mathcal{T} | \hat{\mathbf{p}} \in \hat{t} \in \mathcal{U}^i \} \quad (3.20)$$

部分集合  $\mathcal{U}^i$  の要素の体積の和は、 $i$  番目の平面上の多角形を底面とし  $G$  を頂点とする多角錐の体積として扱えるため、以下では  $i$  番目の平面上の多角形の面積を求める手法につ

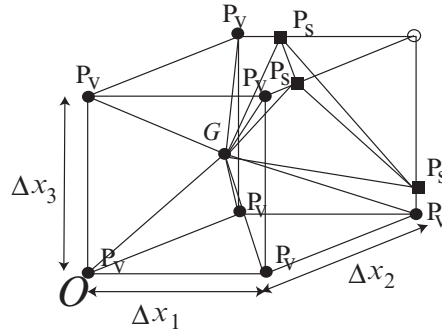


図 3.5: 体積断片を構成する頂点座標  $P_V, P_S$  及びその重心  $G$

いて記述する. 直方体と切断平面の交差問題においては,  $3 \leq n(T^i) \leq 6$  である. 面  $i$  に存在する多角形の頂点座標の集合は  $T^i$  にて求められているため,  $\hat{p} \in T^i$  の凸包を求めるなどして多角形の面積を求めることが可能である. 以下では, 多角形を三角形に分割にして面積を求める手法について記述する.

まず  $3 \leq n(T^i)$  である場合, 任意の 3 点  $(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$  を  $T^i$  から選び最初の三角形を作る. 図 3.6 に示される通り, 4 点目以降は帰納的に以下の手順を繰り返す.  $m \leq n(T^i)$  である場合には  $T^i$  の  $m$  番目の要素である  $\hat{p}_m$  を取り出し, 既に取り出された  $m-1$  点のうち 2 点と  $\hat{p}_m$  を結ぶ線分のなす角を調べる. このとき, なす角を最大とする 2 点と  $\hat{p}_m$  が作る三角形が  $m-2$  個目の三角形である. なす角を最大とする 2 点を  $\hat{p}_a, \hat{p}_b$  とすると, 次式で表される.

$$(\hat{p}_a, \hat{p}_b) \in T^i | \cos \theta_{m;ab} = \min_{(j,k) \in C_{m-1}} \cos \theta_{m;jk} \quad (3.21)$$

ただし,  $C_m$  は, 1 から  $m$  の整数の中から 2 個の整数を選ぶ組み合わせ元とする集合である.  $\hat{p}_m, \hat{p}_a, \hat{p}_b, G$  の 4 点の座標から四面体  $\hat{t} \in \mathcal{U}^i$  の体積  $t$  を求めることができる.  $m = m+1$  として,  $m = n(T^i)$  となるまで同様の手順を繰り返す. 体積断片の体積は, 次式で求められる.

$$f(s) = \sum_{i=1}^7 \sum_{k=1}^{n(\mathcal{U}^i)} t_k \quad (3.22)$$

### 3.2.6 移流フラックス評価

識別関数の移流計算におけるフラックス評価においては, 式 (3.6) に示される断片体積  $V_0$  を求める関数を用いた. フラックスを求める場合には, 界面を表現する平面位置が固定

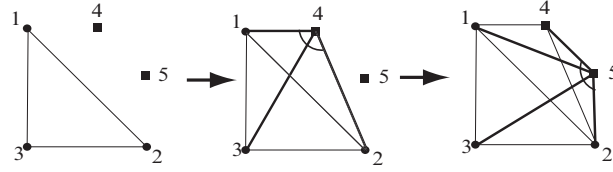


図 3.6: 多角形の三角形への分割手順

表 3.1: フラックス計算の有無と原点移動の有無

	流速	フラックス計算	原点移動
正側の境界	正	有	有
	負	無	-
負側の境界	正	無	-
	負	有	無

されている状態で隣接セルへの移流体積に含まれる識別関数を求めるため、前節にて必要とされた収束計算は必要なく、断片体積を求める関数から直接求めることができる。移流計算は方向分離し、 $x, y, z$  方向に順に移流計算、フラックス評価を行った。ただし、計算 1 ステップ毎にフラックス評価の順番を逆順とした。

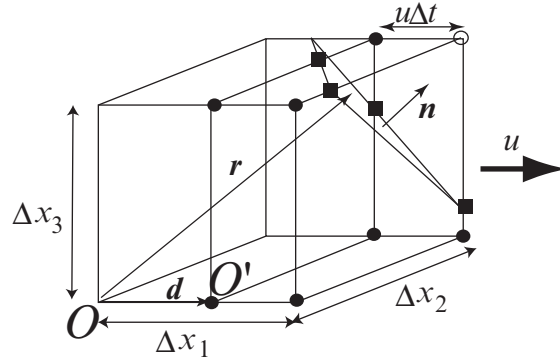
フラックス評価は、各流体セルにおいて移流方向の正側と負側のセル境界面で行い、常に当該流体計算セルから流出するフラックスを求めることとした。移流体積の各辺の長さ  $\Delta'_\beta$ , ( $\beta = x, y, z$ ) は次式で求められる。

$$\Delta'_\beta = \begin{cases} \Delta_\alpha & \alpha \neq \beta \\ \|u_{b\alpha}\Delta t\| & \alpha = \beta \end{cases} \quad (3.23)$$

ここに、 $u_{b\alpha}$  は計算セル境界に定義される  $\alpha$  軸方向の流速成分である。表 3.1 に示される通り、移流体積の原点  $O'$  と計算セル体積の原点  $O$  が異なるパターンは、軸方向に正の向きのセル境界における流速が正の場合のみである。この場合には、切断面を通る点  $n_0$  の位置を原点の移動量  $b$  だけ移動させる必要がある。

$$b_\beta = \begin{cases} 0 & \alpha \neq \beta \\ \|u_{b\alpha}\Delta t\| & \alpha = \beta \end{cases} \quad (3.24)$$

図 3.7 においては、 $d_\alpha = \Delta_\alpha - b_\alpha$  の関係である。原点移動を考慮した切断面位置  $n_0^*$  は

図 3.7:  $x$  正方向へのフラックスの計算例

次式で求められる.

$$n_0^* = n_0 - \Delta + b \quad (3.25)$$

以上の手順にて求められた  $n_0^*, \Delta'_\beta$  および与えられた  $s, n$  を用いて 3.2.5 節に述べられる体積片求積方法を利用してフラックスを求めることができる.

### 3.3 計算手法に関する各種検討

#### 3.3.1 法線ベクトル評価係数に関する検討

本節では, 界面の法線ベクトルを求める式 (3.2) におけるパラメータ  $w_a, w_b$  について簡単な数値実験を通して検討を行った. 表 3.2 に示される通り, ケース A においては隣接セルにおける空間勾配を用いない場合, ケース B においては隣接計算セルの空間勾配との単純平均を用いた場合に相当し, ケース C,D,E においては隣接セルの空間勾配に対する重みが逓減していくケースとした.

計算精度を比較する検証計算例としては, 3次元移流問題のベンチマークとしてよく使われる Single Vortex 問題 [12] を用いた. 計算領域は  $1 \times 1 \times 1\text{m}^3$  の立方体領域とし, 半径  $0.15\text{m}$  の球を  $(0.35, 0.35, 0.35)\text{m}$  に配置した. 3次元計算領域において流れ場  $(u, v, w)$  は式 (3.26) に示され,  $t = 0\text{s}$  から  $t = T\text{s}$  まで移流計算を行った. せん断流れによって計算領域内に初期配置された物体は変形し,  $t = T/2\text{s}$  において最大変形状態を与える. 一方で,  $t = T/2\text{s}$  において式 (3.26) に示される流れ場は反転するため, 理想的な移流スキームを用いれば,  $t = T\text{s}$  においてはせん断変形した物体は初期形状を復元する. 移流計算の精度を測る指標として,  $t = T\text{s}$  における体積占有率の値と初期における体積占有率の値が



表 3.2: 法線ベクトル評価係数に関する検討

ケース名	係数 $(w_a, w_b)$
A	$(1, 0)$
B	$(1, 1)$
C	$(\sqrt{2}, 1)$
D	$(2, 1)$
E	$(4, 1)$

表 3.3: 法線ベクトル評価係数に関する検討結果

ケース	$20^3$	$50^3$	$100^3$
A	$3.230 \times 10^{-3}$	$2.275 \times 10^{-3}$	$1.504 \times 10^{-3}$
B	$3.778 \times 10^{-3}$	$2.624 \times 10^{-3}$	$1.176 \times 10^{-3}$
C	$3.764 \times 10^{-3}$	$2.576 \times 10^{-3}$	$1.173 \times 10^{-3}$
D	$3.741 \times 10^{-3}$	$2.514 \times 10^{-3}$	$1.181 \times 10^{-3}$
E	$3.694 \times 10^{-3}$	$2.421 \times 10^{-3}$	$1.263 \times 10^{-3}$

ら得られる  $E_{L2}$  誤差を用いた,

$$\begin{aligned}
 u(x, y, z) &= 2 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \\
 v(x, y, z) &= -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \\
 w(x, y, z) &= -\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin^2(\pi z)
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

ただし,  $E_{L2}$  は次式にて定義した,

$$E_{L2} = \frac{1}{N} \sum_i^N (\phi_i^{sim} - \phi_i^e)^2 \tag{3.27}$$

式 (3.27) において  $\phi_i^{sim}$  は数値計算結果で  $\phi_i^e$  は理論解である. 時間刻みは, 計算領域内の最大クーラン数が 0.2 となるように調整した. 計算セル分割数は,  $20^3$ ,  $50^3$ ,  $100^3$  のケースを検討し,  $T = 2.0\text{s}$  とした. 各ケースの結果を表 3.3 に示す. なお, 以下の検討では  $100^3$  のケースで最も精度の良い C を採用して法線ベクトルを求めた.

### 3.3.2 切断平面初期値に関する検討

切断平面の初期値が収束計算回数や収束性に与える影響について調べた。単一の計算セルに任意の体積占有率と法線ベクトルを与え、前節に示されたアルゴリズムによって切断面位置を求めた。この際、切断面位置の初期推定値が収束値に近ければ、収束計算が早く終了するものと期待される。また、計算の安定性の面からも初期推定値が収束値に近いことが望ましい。このため、本研究による提案アルゴリズムにおいては式(3.11)を初期値推定に用いている。本節では、初期値推定値に式(3.11)のうち、 $z = 2, 1, 0$ の式を用いた場合をそれぞれ(a),(b),(c)とした。

図3.8は、(a),(b),(c)にある法線ベクトルと体積占有率を与えた時のパラメーター  $s$  の初期推定値と収束値の関係を示したものである。

図3.8(a)においては、成分が $(1, 0, 0)$ である法線ベクトル  $\mathbf{n}$  と体積占有率  $\phi$  が与えられた時の  $s^*$  の初期推定値が実線で、収束値が破線で示されている。また、右の  $y$  軸に各体積占有率  $\phi$  が与えられた時に必要となった収束計算回数  $N_c$  をとっており、黒塗りの四角にてプロットしている。法線ベクトルの2成分が0であるため、 $s^*$  と  $\phi$  の関係は単純な線形関係となるため、良好な初期値推定が可能であり、収束計算回数も  $\phi$  の全域で2回となっている。

次に、図3.8(b)においては、法線ベクトル成分として $(1, 1, 0)$ を与えた場合の  $s^*$  と  $\phi$  の関係を示す。初期値推定に  $s^* = 0.9\phi^{1/2}$  を用いるが、特に0付近で収束値のプロットと形が一致する。0付近では初期値の推定値と収束値が近づいており、早い収束が期待できる。この場合、収束のための繰り返し回数は5回から7回である。また、参考のため、(a)のケースで用いた初期値推定式も記入してある。

最後に、図3.8(c)においては、法線ベクトル成分として $(1, 1, 1), (1, 1, 2), (1, 1, 3)$ を与えた場合の  $s^*$  と  $\phi$  の関係を示す。(b)と同様、0付近では(c)の式による推定が(a)による推定に比べて収束値に近い値を与えていることが確認できる。また、法線ベクトルの方向によって収束値の分布形が変化するが、その分布形は式による推定値と同様の形状である。

図3.9には、(c)のケースにおける収束計算回数をプロットしている。初期値の予測として(a)を用いた場合及び(c)を用いた場合で場合分けし、さらにそれぞれのケースにて法線ベクトル成分が $(1, 1, 1)$ であるケースと $(1, 1, 2)$ であるケースを検討した。(a)のケースでは、体積占有率が0.5付近では収束回数が少ないが、0あるいは1近辺で収束計算回数が増加する。実際、 $\phi = 0.001$ においては(a)のケースではニュートン法が収束せずに発散した。一方で、(c)のケースは  $\phi$  の値によらずに収束計算回数が5回前後でまとまっている。このため、計算の安定性の面からも、(c)による初期値推定が優れていると考えられる。

表 3.4: 移流計算における計算順序

ケース	順番
A	$x \rightarrow y \rightarrow z$
B	$z \rightarrow y \rightarrow x$
C	$(x \rightarrow y \rightarrow z, z \rightarrow y \rightarrow x)$
D	$(x \rightarrow y \rightarrow z, y \rightarrow z \rightarrow x, z \rightarrow x \rightarrow y)$
E	$(x \rightarrow y \rightarrow z, y \rightarrow z \rightarrow x, z \rightarrow x \rightarrow y, y \rightarrow x \rightarrow z, x \rightarrow z \rightarrow y, z \rightarrow y \rightarrow x)$

### 3.3.3 移流計算方向の順番に関する検討

本節では，移流計算の空間方向の順番に関して計算精度に対する影響を調べた．例題として，以下に示す球体の回転運動問題を取り上げた．

計算領域は， $1 \times 1 \times 1\text{m}^3$  の立方体領域とし，半径  $0.15\text{m}$  の球を  $(0.35, 0.35, 0.5)\text{m}$  に配置した．計算領域には，次式によって得られる流れ場  $\mathbf{u}\text{m/s}$  を与えた．

$$\mathbf{u} = (u, v, w) = (-(y - 0.5), (x - 0.5), 0) \quad (3.28)$$

時間刻みは計算領域分割に応じて調整し，計算領域内の最大クーラン数が  $0.2$  となるように調整した．球体の回転運動は，円軌道を 1 周終了するまで行った．

計算順序は，表 3.4 に示される A から E のパターンについて検討した．A と B はそれぞれ毎ステップにおける移流計算の方向の順番が決まっているパターンである．C は，A と B を 1 ステップ毎に交互に入れ替えるパターンである．D は，3 種類の順番を 1 ステップ毎に入れ替えるパターンであり，E は同様に 6 種類の順番を入れ替えるパターンである．表 3.5 に計算結果を示す．計算セル分割を  $50^3$ ， $80^3$  として  $E_{L2}$  誤差を評価したが，A から E のケース間で有意な違いは確認できなかった．このため，移流計算の順序が計算精度に与える影響は少ないものと考えられる．

## 3.4 検証計算

### 3.4.1 球体回転問題

移流計算精度と解の収束性を確かめる検証問題として，球体回転問題を行った．計算領域分割はそれぞれ  $20^3$ ， $40^3$ ， $80^3$ ， $160^3$  の等分割とした．計算結果を表 3.6 および表 3.7 に

**表 3.5:** 移流方向計算順序の違いによる  $E_{L2}$  誤差

ケース	$50^3$	$80^3$
A	$2.469 \times 10^{-4}$	$1.832 \times 10^{-4}$
B	$2.470 \times 10^{-4}$	$1.833 \times 10^{-4}$
C	$2.470 \times 10^{-4}$	$1.833 \times 10^{-4}$
D	$2.469 \times 10^{-4}$	$1.832 \times 10^{-4}$
E	$2.470 \times 10^{-4}$	$1.833 \times 10^{-4}$

示す. **表 3.6** に記載されている  $r_e$  は, 例えば  $X^3$  のケースと  $Y^3$  のケースの間では, 次式で求めた.

$$r_e = \log_2(E_{L2}(X)/E_{L2}(Y)) \quad (3.29)$$

ただし,  $E_{L2}(X)$  は,  $X^3$  のケースで得られる  $E_{L2}$  である. 一方, **表 3.7** に記載されている  $r_t$  は, 次式で求めた.

$$r_t = \log_2(T(Y)/T(X)) \quad (3.30)$$

ただし,  $T(X)$  は,  $X^3$  のケースにおける計算時間である. 比較検討に用いた移流計算手法として, 文献 [3] による元の 3DPLIC および PLIC 以外の手法として THINC\WLIC を選定した. **表 3.6** によると,  $E_{L2}$  の比較においては, 3DPLIC(直接) と 3DPLIC(収束) に精度と収束性の上で差異が認められている. 特に, 3DPLIC(直接) では収束性が比較的低い値となっている.

THINC\WLIC との比較においては, 3DPLIC(収束) が精度および収束性において優勢であることが確認できる.

一方, **表 3.7** に示されるように計算時間を比較すると, 3DPLIC(直接) が最も高速である結果を得た. アルゴリズム構築上は場合分けが煩雑であるが, 計算効率は優れているものと考えられる. 反復計算の都度体積断片の求積を行う 3DPLIC(収束) は計算量の多さから, 最も計算時間を要する結果となった.

### 3.4.2 3次元 Single Vortex 問題

次に, 前節と同様の Single Vortex 問題を用いて精度検証を行った. 計算セル分割は,  $20^3, 40^3, 80^3, 160^3$  を用いた以外の条件は同じである.

表 3.6: 球体回転問題 (一周) における各手法の  $E_{L2}$  誤差

セル数	THINC\ WLIC	3DPLIC (収束)	3DPLIC (直接)
$20^3$	$6.488 \times 10^{-4}$	$4.039 \times 10^{-4}$	$4.454 \times 10^{-4}$
$r_e$	0.3354	0.5142	0.4153
$40^3$	$5.142 \times 10^{-4}$	$2.828 \times 10^{-4}$	$3.340 \times 10^{-4}$
$r_e$	0.5236	0.6256	0.4992
$80^3$	$3.577 \times 10^{-4}$	$1.833 \times 10^{-4}$	$2.363 \times 10^{-4}$
$r_e$	0.7291	0.8400	0.506
$160^3$	$2.158 \times 10^{-4}$	$1.024 \times 10^{-4}$	$1.664 \times 10^{-4}$

表 3.7: 球体回転問題における各手法の計算時間

セル数	THINC\ WLIC	3DPLIC (収束)	3DPLIC (直接)
$20^3$	1.966	7.688	1.202
$r_t$	3.183	2.769	2.762
$40^3$	17.86	52.41	8.153
$r_t$	3.743	3.046	3.844
$80^3$	239.1	432.9	117.1
$r_t$	3.497	3.211	3.753
$160^3$	2700	4008	1578

**表 3.8** に THINC\WLIC [13] および 3DPLIC によって得られた  $E_{L2}$  誤差を示す。20<sup>3</sup> の計算セル分割を用いたケースでは、3DPLIC(直接) が相対的に高い精度を与えたが、収束性は 3DPLIC(収束) の方が優れており、40<sup>3</sup> よりも細かい計算セル分割を用いた場合には 1.0 を超える収束性を示している。また、160<sup>3</sup> の計算セル分割を用いたケースでは 3DPLIC(収束) の方が逆転して精度が高くなっている。**表 3.9** には、基準時間に対する計算時間とその増加率を示す。**表 3.9** に示される計算時間は、1 次風上差分法で 20<sup>3</sup> の計算ケースを実行した際に要する計算時間を基準時間とし、それぞれの計算ケースで基準時間の何倍の計算時間を要したかを示している。この結果より、3DPLIC(収束) の計算時間は THINC\WLIC の計算時間の 1.5 倍から 3.5 倍程度の値となることが分かった。特に、計算セル数が多くなった場合に 3DPLIC(収束) の計算時間の増加割合が 3DPLIC(直接) と THINC\WLIC と比べて鈍くなっていることが関係していると考えられる。

球回転問題および Single Vortex 問題において 3DPLIC(収束) が 3DPLIC(直接) よりも高い収束性を示すことについては、3DPLIC(収束) は計算セルサイズによらず体積占有率に対する相対誤差で誤差制御した上で切断平面位置を決めているが、3DPLIC(直接) ではそのような誤差制御は行っていない。以上の切断平面位置決定上のアルゴリズムの差異により、計算セルサイズが小さくなる程 3DPLIC(収束) の優位性が現れているものと考えられる。

また、**図 3.10** には同一精度の移流計算に必要な計算時間の比較を各手法毎に比較した。**図 3.10** に示される (s) は Single Vortex 問題の計算による結果で、(r) は前節の球の回転運動問題の計算による結果である。どちらのベンチマーク問題に対しても、3DPLIC による結果は、どちらの検証問題に対しても同一計算時間に対して得られる計算精度が比較的高い傾向が確認できる。また、3DPLIC(収束) の方が 3DPLIC(直接) と比較して、計算時間の増分に対する精度の向上率が大きくなっている。

次にスタンフォード大学の Web サイトにて公開されているスタンフォードバニーと呼ばれる 3D スキャンデータを用いて同様の Single Vortex 問題を扱った。移流計算に用いたスキームは 3DPLIC(収束) および THINC\WLIC である。計算セル分割を 100<sup>3</sup> として行った結果を**図 3.11** に示す。3DPLIC では  $E_{L2} = 2.332 \times 10^{-3}$ 、THINC\WLIC では  $4.532 \times 10^{-3}$  が得られ、精度の面では 3DPLIC が優位であった。また、**図 3.11** において目視による比較を行った場合、以下の点で 3DPLIC が優位であった。一点目は、THINC\WLIC のケース ( $t=2.0$ ) で見られるスタンフォードバニーの首から肩にかけて見られる光の反射は初期状態において見られないものである。3DPLIC においては、初期状態及び形状復元後にこのような光の反射が見られない。二点目にスタンフォードバニーの首から胸にかけてのラインの復元性を見ると、3DPLIC においては比較的よく復元しているのに対して THINC\WLIC のケースではラインが崩れている。

表 3.8: Single Vortex 問題 (球) における  $E_{L2}$  誤差と収束性

セル数	THINC\ WLIC	3DPLIC (収束)	3DPLIC (直接)
$20^3$	$3.474 \times 10^{-3}$	$4.002 \times 10^{-3}$	$3.409 \times 10^{-3}$
$r_e$	0.0567	0.2804	0.3765
$40^3$	$3.340 \times 10^{-3}$	$3.295 \times 10^{-3}$	$2.626 \times 10^{-3}$
$r_e$	0.5245	1.156	0.7634
$80^3$	$2.322 \times 10^{-3}$	$1.479 \times 10^{-3}$	$1.547 \times 10^{-3}$
$r_e$	0.9015	1.116	0.678
$160^3$	$1.243 \times 10^{-3}$	$6.825 \times 10^{-4}$	$9.669 \times 10^{-4}$

表 3.9: Single Vortex 問題 (球) における計算時間

セル数	THINC\ WLIC	3DPLIC (収束)	3DPLIC (直接)
$20^3$	2.323	6.434 ( 2.77 )	1.956
$r_t$	2.289	2.614	2.362
$40^3$	11.35	39.38 ( 3.47 )	10.05
$r_t$	3.766	2.937	3.273
$80^3$	154.4	301.5 ( 1.95 )	97.14
$r_t$	3.575	3.216	3.509
$160^3$	1840	2802 ( 1.52 )	1105

表 3.10: Box 内 Single Vortex 問題の  $E_v$ 

Youngs* (32 × 32 × 64)	$1.60 \times 10^{-2}$
CLCIR* (32 × 32 × 64)	$1.61 \times 10^{-2}$
CLC-CBIR* (32 × 32 × 64)	$1.47 \times 10^{-2}$
THINC\WLIC(40 × 40 × 80)	$1.62 \times 10^{-2}$
3DPLIC(収束)(40 × 40 × 80)	$1.56 \times 10^{-2}$

\* は文献 [9] からの引用

最後に、流れ場が次式で与えられるベンチマークテスト [9] を行った。計算に用いた移流スキームは、スタンフォードバニーの Single Vortex 問題と同様とした。

$$\begin{aligned}
u &= \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \cos(\pi t/T) \\
v &= -\sin^2(\pi y) \sin(2\pi x) \cos(\pi t/T) \\
w &= \{1 - 2[(0.5 - x)^2 + (0.5 - y)^2]^{1/2}\}^2 \cos(\pi t/T)
\end{aligned} \tag{3.31}$$

$t = 0\text{s}$  から  $t = T\text{s}$  まで移流計算を行った。計算格子分割を  $40 \times 40 \times 80$  とし  $T = 9\text{s}$  とした。計算結果を図 3.12 に示す。本計算における誤差  $E_v$  は  $E_v = \sum_i \Omega_i |\phi_i^{\text{sim}} - \phi_i^e|$  にて定義した。ただし、 $\Omega_i$  は計算セル体積である。表 3.10 に得られた  $E_v$  および文献 [9] に示されている同一検証例題に対する他手法の  $E_v$  を比較する。計算セル数が若干異なるが、ほぼ同様の結果を得られていることを確認した。

### 3.5 章のまとめ

本研究では、気液混相流れ数値計算における高精度界面捕捉法として 3 次元 PLIC に対して、界面近似平面と計算セル体積の位置関係によらず統一的に平面位置を決定するアルゴリズムを提案し、その有効性を基本的なベンチマーク問題を通して確かめた。

計算精度と計算時間の関係については、既往アルゴリズムによる 3 次元 PLIC および THINC\WLIC との比較検討を行い、同一計算セルでは計算精度の点で優位であることを示した。計算時間は THINC\WLIC の 1.5 倍から 3.5 倍程度を要するが、収束性が高いため計算セル数が増える程 THINC\WLIC との計算時間の比は 1 に近づく傾向にある。直接的に体積を求める 3 次元 PLIC と比較すると、計算時間を長く要するものの比較的高い収束性を有するため、計算セル数が増加すると精度の面では優位に立つことを確認した。



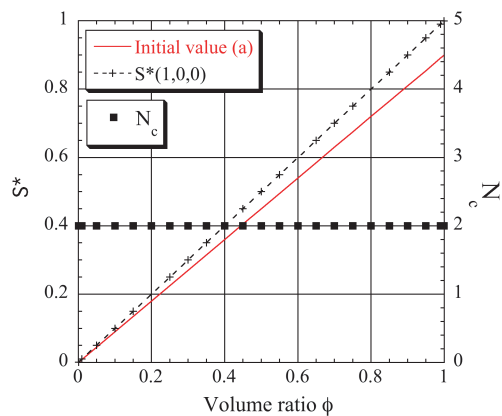
提案アルゴリズムは、与えられた平面位置から体積断片の体積を求めるアルゴリズムを利用して収束計算を用いて切断平面を求めるものであるため、初期値として与える切断平面位置が収束性に影響を与える。本手法においては初期値の与え方についても検討したが、体積占有率のみからの初期値の推定には限界があるため、法線ベクトルと体積占有率の双方を利用した更に精度の良い初期値の推定が課題である。

他の課題としては、計算セル内に 3 種類以上の相が混ざった場合など、計算セル内の界面形状が 1 平面では表現しきれない状態の取り扱いや、隣接計算セル間での界面形状の整合性、界面形状の曲面による表現などが挙げられる。

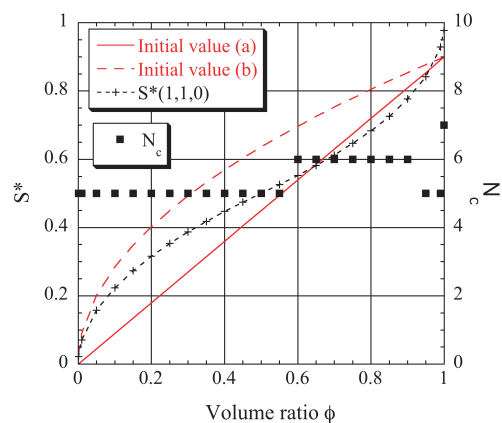
## 参考文献

- [1] Noh W.F. and Woodward P. SLIC(simple line interface method). *Lecture Notes in Physics*, Vol. 24, pp. 330–340, 1976.
- [2] Denis Gueyffier, Jie Li, Ali Nadim, and Ruben Scardovelli ad Stéphane Zaleski. Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 152, pp. 423–456, 1999.
- [3] Benjamin Biausser, Stephan Guignard, Richard Marcer, and Philippe Fraunié. 3d two phase flows numerical simulations by SL-VOF method. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 45, pp. 581–604, 2004.
- [4] Youngs D.L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Vol. 24, pp. 273–285, 1982.
- [5] Scardovelli R. and Zaleski S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 31, pp. 567–603, 1999.
- [6] Puckett E.G., Almgren A.S., Bell J.B., Marcus D.L., and Rider W.J. A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 130, pp. 269–282, 1997.
- [7] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry. *J. Comput. Phys.*, Vol. 225, No. 2301–2319, 2007.

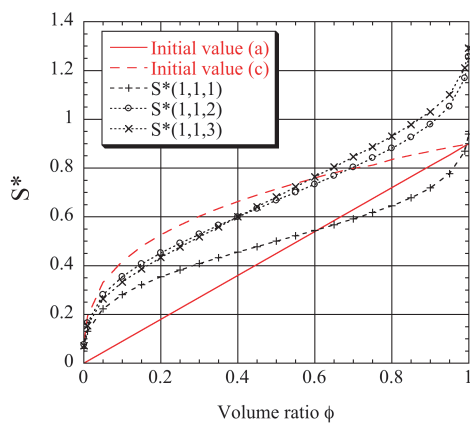
- [8] Ruben Scardovelli and Stephane Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split Eulerian-Lagrangian advection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 41, pp. 251–274, 2003.
- [9] Lopez J., Zanzi C., Gomez P., Faura F., and Hernandez J. A new volume of fluid method in three dimensions-Part II: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-Bezier fit. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 58, pp. 923–944, 2008.
- [10] Zhaoyuan Wang, Jianming Yang, and Frederick Stern. A new volume-of-fluid method with a constructed distance function on general structured grids. *J. Comput. Phys.*, Vol. 231, pp. 3703–3722, 2012.
- [11] Lopez J., Hernandez J. Gomez P., and Faura F. An improved PLICVOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 208, pp. 51–74, 2005.
- [12] Leung S. and Zhao H. A grid based particle method for moving interface problems. *J. Comput. Phys.*, Vol. 228, No. 8, pp. 2993–3024, 2009.
- [13] Yokoi K. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. *J. Comput. Phys.*, Vol. 226, pp. 1985–2002, 2007.



(a) 法線ベクトルの 2 成分が 0 の場合



(b) 法線ベクトルの 1 成分が 0 の場合



(c) 法線ベクトルの全ての成分が 0 でない場合

図 3.8: 体積占有率  $\phi$  と  $s$  の初期推定値および収束値の関係

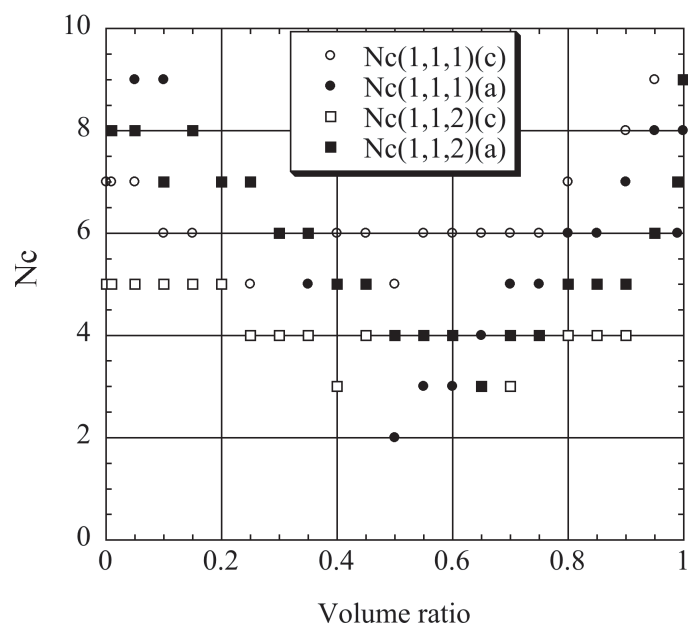


図 3.9: 収束計算回数  $N_c$  と体積占有率  $\phi$  の関係

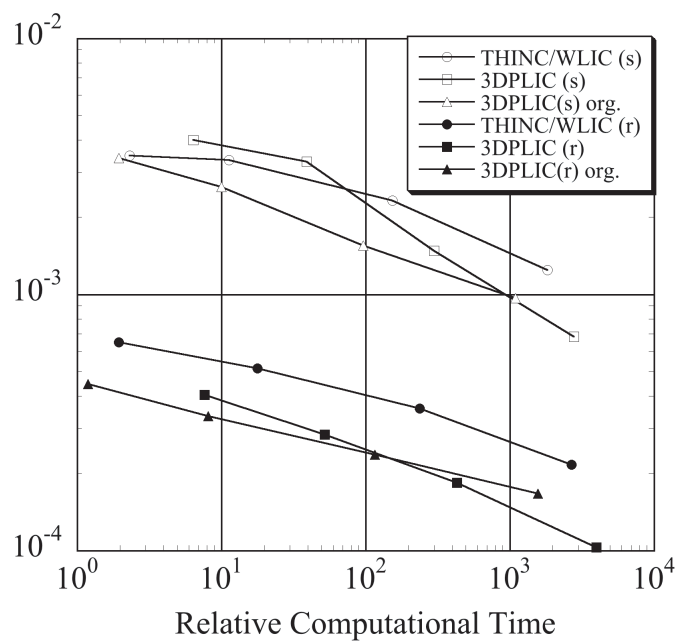


図 3.10: 計算精度と計算時間

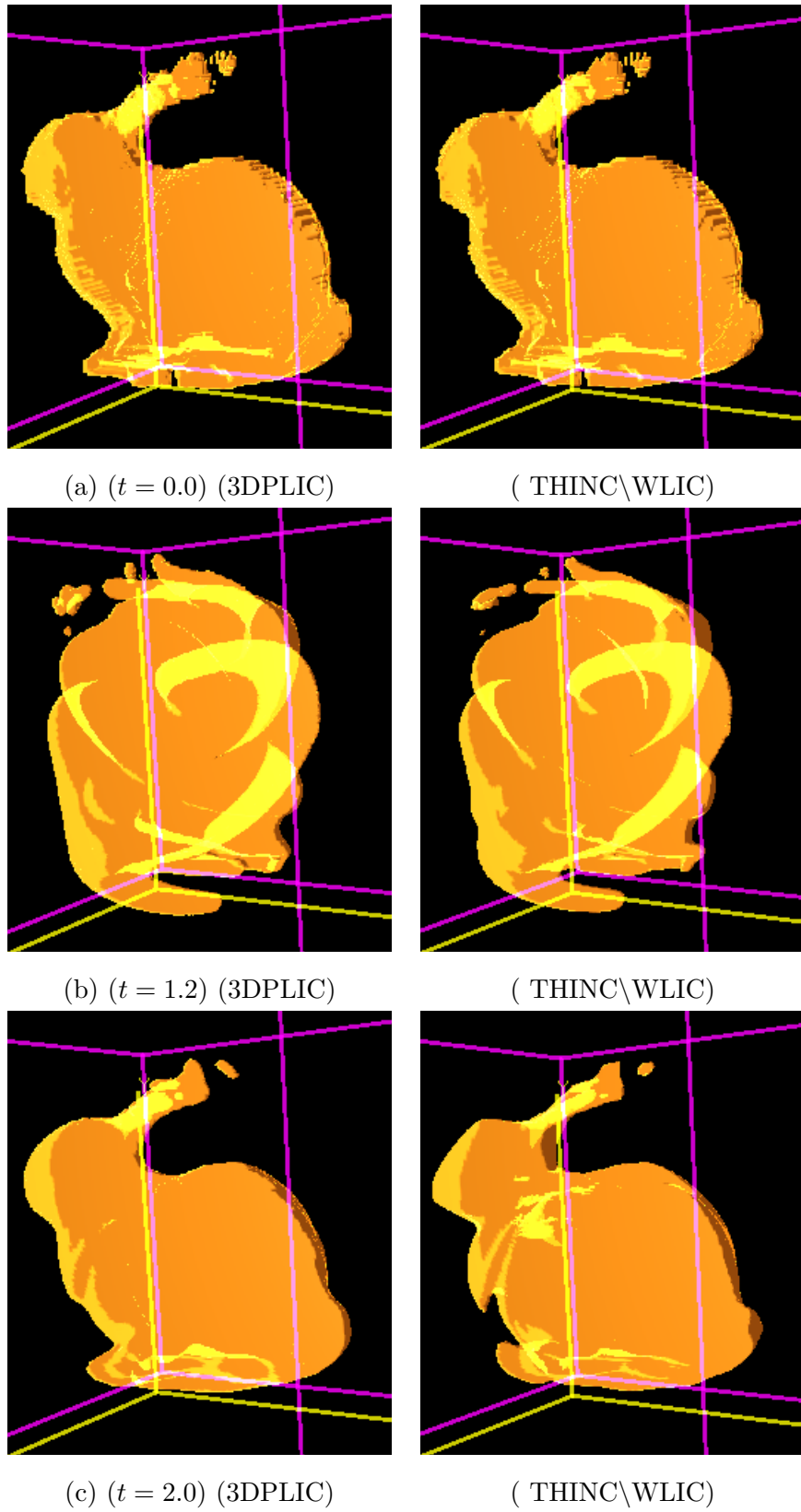
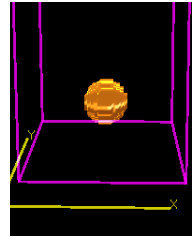
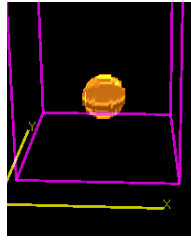
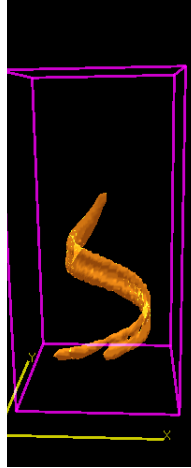


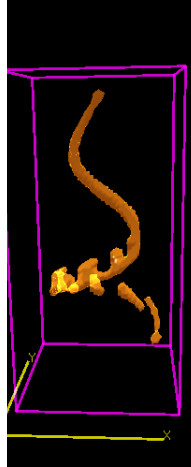
図 3.11: Single Vortex 問題



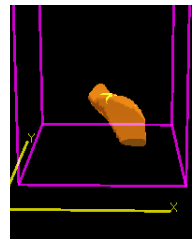
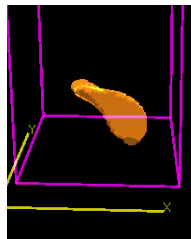
(a) ( $t = 0.0$ ) (3DPLIC) ( THINC\WLIC)



(b) ( $t = 1.8$ ) (3DPLIC) ( THINC\WLIC)



(c) ( $t = 5.4$ ) (3DPLIC) ( THINC\WLIC)



(d) ( $t = 9.0$ ) (3DPLIC) ( THINC\WLIC)

図 3.12: 3次元せん断流れ移流計算の比較

## 第4章 界面形状分類に基づく表面張力評価法

### 4.1 研究の背景

当初2次元計算にて提案されたVOF法[1]においては、計算セル内の界面位置を得るために、識別関数の局所勾配から計算セル内の気液界面形状を直線にて近似する手法を用いている。表面張力を算出するために必要な界面の曲率については、直線近似と同様の考え方で求めることができるとされている。一方で、界面形状の直線近似という2次元計算領域に対する手法の3次元計算への拡張については、簡単でないと予想されることが言及されている。

2次元計算のみならず3次元計算にも適用可能でありかつ界面形状の直接的な平面近似を必要としない界面張力評価法として、CSFモデル[2]が提案された。CSFモデルは、異なる流体相の間に数セル程度の幅の界面領域を定義し、表面力である界面張力を界面領域内の体積積分に変換するモデルであり、式(4.1)によって界面張力を求める。面積力を体積力に変換するため、界面形状を幾何的に再構築する必要がなく、比較的容易に3次元計算へ拡張できるという利点がある。

$$\mathbf{f}_s(\mathbf{x}_c) = \sigma \kappa(\mathbf{x}_c) \frac{\nabla \phi(\mathbf{x}_c)}{[\phi]} \quad (4.1)$$

ただし、 $\mathbf{x}_c$ は体積力の定義点、 $\mathbf{f}_s$ は体積力に変換された表面張力、 $\sigma$ は界面張力係数、 $\phi$ は識別関数、 $[\phi]$ は流体間の識別関数の差である。

一方、界面領域を表現するために十分な解像度の計算セルが必要とされるため、気泡を表現するための計算セル数の総数は多くなりがちである。CSFモデルの数値安定性を確保するためには界面領域の識別関数の空間勾配の滑らかさが必要であることはモデル提案当初から指摘され、B-スプライン関数[3]による識別関数平滑化が有効であることが報告されている[2]。

こうした中、例えば第2章および第3章にて検討された高精度自由界面捕捉などを利用して識別関数移流計算の高精度化を行うとCSFモデルの安定した使用に必要とされる有限の界面幅が確保できないことによって計算の数値不安定性あるいは計算精度の低下が問題となる。このため、識別関数の移流計算の高精度化に伴い、界面捕捉の高精度化に対応した界面張力評価法を検討する必要がある。また、モデル提案当初から比較して飛躍的に

進歩した数値計算環境を考慮すると、当時煩雑とされた 3 次元界面形状の多面体近似に基づく界面張力評価法について検討する余地が残されている。


そこで本章では、数値拡散を抑えた識別関数の使用を前提として、識別関数の空間勾配が自由界面付近で急変する条件の下でも安定して表面張力を評価できる手法について提案した。提案された手法では、自由界面に働く表面張力を微小体積内に推定される微小界面の周囲に働く表面張力の和として扱う評価法を提案し、その適用性を検討した。

## 4.2 表面張力評価基礎式

表面張力の基礎方程式として以下のラプラスの方程式がよく知られている。

$$p_{\text{jump}} = \sigma \kappa = \sigma \left\{ \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right\} \quad (4.2)$$

ここに、 $p_{\text{jump}}$  は界面における圧力ジャンプを示し、 $\sigma$  は界面張力係数、 $\kappa$  は界面曲率である。 $R_1$  および  $R_2$  は界面における曲率半径である。ラプラスの方程式を用いると、界面曲率と界面張力係数から得られる表面力を界面張力として、界面を挟んで生じる圧力差を求めることができる。3 次元数値計算におけるラプラス式の適用を前提とすると、VOF 法提案当初の手法に従い界面形状を表現する近似平面を用いて界面張力を求めるためには、曲率あるいは曲率半径の評価において次の課題が生じる。理想的には、界面を表現する 3 次元近似曲面を 2 階微分可能な 2 変数の媒介変数表示の形式で求める必要がある。この場合には、各計算セル境界における近似曲面および導関数の連続性等の問題へ対応することが課題と考えられる。この課題へのアプローチは、大きく二つの段階に分けられると考えられる。一つ目の段階では、与えられた識別関数から近似曲面の定義が必要な計算セルの抽出と当該計算セルのセル境界面と近似曲面の交差位置の推定および法線ベクトルの推定を行う。これらは、識別関数から計算セル内に推定する近似曲面に求められる条件を収集する過程に相当する。二つ目の段階では、最初の段階で収集した条件を満たす近似曲面を求める段階である。

本研究では、二つ目の段階において 2 階微分可能な曲面近似を行うよりも簡便な方法として、 4.6 に示される界面基本形状を事前に用意し、近似曲面に求められる条件を満たす形状を適宜選択して界面形状を推定する。界面基本形状は直方体の集合体で表現されるため曲率の評価はできないが、近似界面と計算セル境界面の交差位置や交差線延長は容易に推定することができる。このように、本研究では曲率による界面張力評価ではなく、微小界面要素周囲に働く界面張力の和によって直接的に界面張力を評価する手法について検討した。



界面の平面近似によらず界面基本形状の選択によって交差線の評価を行う理由としては、界面の平面近似によると交差線の位置が必ずしも正確でないことによる。提案手法では、計算セル頂点に定義される流体識別子を利用することで交差線が発生する計算セル境界を特定した後、特定された計算セル境界にのみ交差線が発生するように界面近似を行っている。また、各計算セル境界における界面交差位置の整合性を保った上で界面張力評価を行うため、計算セル内部の界面形状の近似には敢えて曲面を用いず、直方体の組み合わせで表現できる形状とした。

界面近似形状の精度は必ずしも高次精度とは限らないが、交差線が発生する計算セル境界位置は正確であり、長さについては計算セル幅に対して 1 次精度程度の精度を有していると考えられる。

ラプラスの方程式導出の基礎方程式となる界面を含む微小領域における力の釣り合い方程式である式 (4.3) を用いて表面張力を評価する方法について以下で検討する。

$$p_{\text{jump}}\Delta S = \sigma \sum_i \Delta L_i < \mathbf{t}_i, \mathbf{n} > \quad (4.3)$$

ここに、 $\Delta S$  は微小領域における界面面積、 $\Delta L_i$  は微小界面の周囲延長を構成する  $i$  番目の線分の延長、 $\mathbf{t}_i$  は  $i$  番目の線分における界面接線ベクトルおよび  $\mathbf{n}$  は界面法線ベクトルである。

以下では、式 (4.3) の離散化について述べる。図 4.1(1) において図中の正方形は 2 次元計算セルを示し、N,S,W,E はセル境界を示す。セル境界 W からセル境界 E にかけて円弧状の界面がセル内部を横切っている。セル境界 W および E において働く表面張力  $T_w, T_E$  は、奥行きを 1、表面張力係数を  $\sigma$  とすると  $T_w = T_E = \sigma$  となる。セル境界 W および E における界面の接線単位ベクトルを  $\mathbf{t}_W, \mathbf{t}_E$  とすると、 $y$  方向に働く表面張力  $T$  は次の式で求められる。

$$T = \sigma(t_{Wy} + t_{Ey}) \quad (4.4)$$

ただし、 $t_{Wy}, t_{Ey}$  は接線ベクトル  $\mathbf{t}_W, \mathbf{t}_E$  の  $y$  成分である。従って、セル境界における界面の接線方向が得られればセルに働く表面張力を求めることができる。

従って、ある計算セルに働く  $\alpha$  方向の界面張力  $T_\alpha$  は、式 (4.5) で表される。

$$T_\alpha = \sum_{i=N,S,W,E} T_i t_{i\alpha} \quad (4.5)$$

ここに、 $N, S, W, E$  は 2 次元正方計算セルの各セル境界を指す指標とし、 $T, t_\alpha$  はそれぞれ表面張力およびセル境界における界面の接線ベクトルの  $\alpha$  成分である。計算セルの体積占有率の分布からセル境界における界面法線ベクトルを求めることにより、式 (4.5) により計算セルに働く表面張力を求める。

以上の考え方を 3 次元に拡張した場合、式 (4.6) に示されるように、ある計算セル境界面における表面張力  $\mathbf{T}$  は、セル境界における法線ベクトル  $\mathbf{n}_b$  および交差線ベクトル  $\mathbf{L}$  の外積として得られる接線ベクトルに表面張力係数を掛けて得られるものと考えられる。

$$\mathbf{T} = \sigma \mathbf{n}_b \times \mathbf{L} \quad (4.6)$$

図 4.1(2) においては、6 面体 OABC-EFGH が 3 次元計算セルであり 3 点  $P_{S1}$ ,  $P_{S2}$ ,  $P_{S3}$  によって構成される曲面が界面である。点  $P_{S1}$  から点  $P_{S2}$  に向かう曲線が界面と計算セル境界の交差線である。計算セル境界には法線ベクトル  $\mathbf{n}_b$  および交差線の接線ベクトルに相当する交差線ベクトル  $\mathbf{L}$  が図示されている。当該計算セルにおける表面張力は同様に求められた  $\mathbf{T}_{12}$ ,  $\mathbf{T}_{23}$ ,  $\mathbf{T}_{31}$  の和として得られる。

表面張力  $\mathbf{T}$  を得るためには、体積占有率  $\phi$  の値の空間分布から表面張力評価に必要な計算セル境界面と仮想界面の交差線延長  $L$  およびセル境界における法線ベクトル  $\mathbf{n}_b$  を評価する必要がある。具体的な数値計算手順は、図 4.2 に示されるフローチャートの通りである。上記の考え方に基づいて表面張力を評価するためには、気液界面と計算セル境界が交差することによって生じる線分の位置と長さを精度よく求める必要がある。交差線の発生位置を特定するために、計算セル頂点に流体識別子を定義し、界面通過位置を特定することとした。次に、計算セル体積の頂点に定義された流体識別子の分布パターン (以下、セルタイプと呼ぶ。) によって図 4.5 に示される通り、最大 13 種類のセルタイプを識別する。このうち主要なセルタイプに対して、各計算セル境界における交差線発生位置と整合がとれる様な界面基本形状を想定する。図 4.6 に示される通り、体積占有率の値に応じて各セルタイプに対して最大 3 種類の界面基本形状を想定し、体積占有率と整合がとれる様に界面形状を推定する。推定された界面形状から各セル境界面における交差線の延長を求める。各セル境界面における表面張力の和をとり、当該計算セルにおける表面張力とする。

以下では、計算セル中心における法線ベクトル評価法、流体識別子の定義、計算セルタイプの識別、界面形状の決定および交差線延長の評価について、順を追って説明する。

### 4.3 セル境界における法線ベクトル評価

セル境界における界面の法線ベクトルを求めるために、式 (4.7) に示されるように体積占有率  $\phi$  の局所勾配からセル中心における法線ベクトル  $\mathbf{n}_c$  を求めた。

$$\mathbf{n}_c = \nabla \phi \quad (4.7)$$

体積占有率  $\phi$  の勾配は式 (4.8) にて求めた。法線ベクトルの滑らかな変化を確保するために、体積占有率の勾配を算出する計算セル範囲を広くとっている。また、式 (4.8) で求め

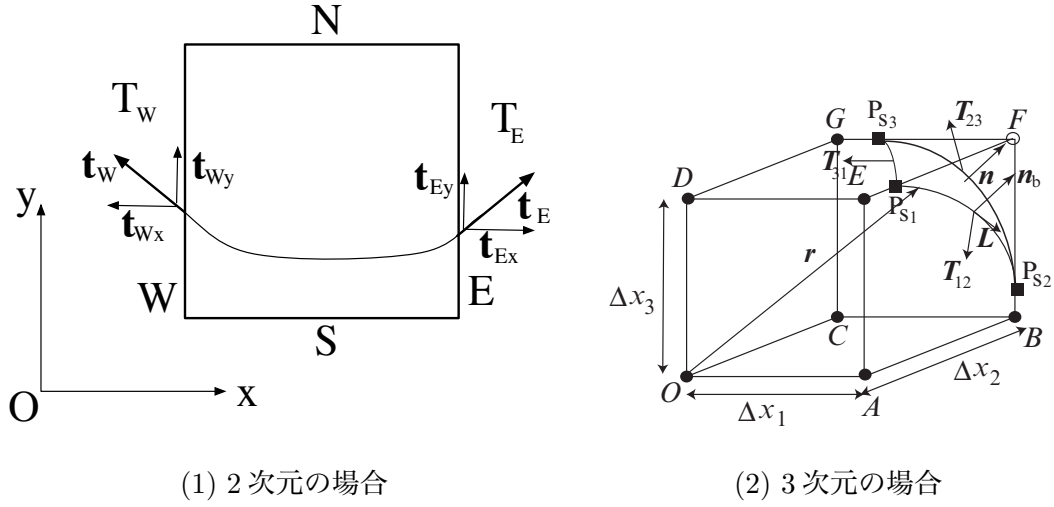


図 4.1: 計算セルあたりの表面張力評価

た法線ベクトルはセル中心における法線ベクトルである.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha i,j,k}} &\approx \frac{1}{5} \left[ \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha},j+\delta_{2\alpha},k+\delta_{3\alpha}} - \phi_{i-\delta_{1\alpha},j-\delta_{2\alpha},k-\delta_{3\alpha}}}{2\Delta x_{\alpha}} \right. \\
 &+ \sum_{\substack{\beta=1,2,3 \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha}+\delta_{1\beta},j+\delta_{2\alpha}+\delta_{2\beta},k+\delta_{3\alpha}+\delta_{3\beta}} - \phi_{i-\delta_{1\alpha}+\delta_{1\beta},j-\delta_{2\alpha}+\delta_{2\beta},k-\delta_{3\alpha}+\delta_{3\beta}}}{2\Delta x_{\alpha}} \\
 &\left. + \sum_{\substack{\beta=1,2,3 \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j+\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k+\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}} - \phi_{i-\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j-\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k-\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}}}{2\Delta x_{\alpha}} \right] \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

ここに、 $\Delta x_{\alpha}$  は  $\alpha$  方向のセル幅であり、 $\delta_{ij}$  はクロネッカーのデルタである. セル境界における法線ベクトル  $\mathbf{n}_b$  は同一セル境界面を共有する計算セル  $\mathbf{x}_0$  および  $\mathbf{x}_1$  の中心に定義されている法線ベクトル  $\mathbf{n}_c$  および体積占有率  $\phi$  から式 (4.9) を用いて求めた.

$$\mathbf{n}_b = \frac{\phi(\mathbf{x}_0) \mathbf{n}_c(\mathbf{x}_0) + \phi(\mathbf{x}_1) \mathbf{n}_c(\mathbf{x}_1)}{\phi(\mathbf{x}_0) + \phi(\mathbf{x}_1)} \quad (4.9)$$

#### 4.4 セル頂点における流体識別子

次に、界面と計算セル境界面のなす交差線を求める. 計算セル体積内に界面基本形状を推定し、推定した界面基本形状と計算セル境界面のなす交差線を求める. 計算セル体積内に界面基本形状を推定するために、セル頂点に流体識別子  $\Psi_g(\mathbf{x}_g)$  を定義する.  $\Psi_g(\mathbf{x}_g)$  は体積占有率のように 0 から 1 まで連続的に変化するものではなく、当該格子点の位置がどちらの流体に属するか明確に判定するため、0 か 1 のどちらかの値をもつ離散的な変数

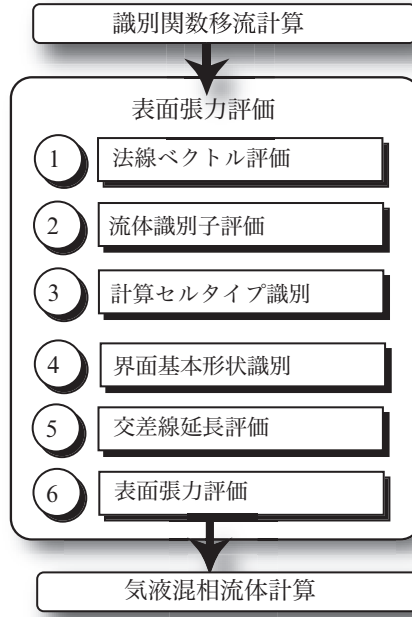


図 4.2: 界面張力評価のフローチャート

である。ただし、セル頂点が流体の界面と重なる場合は、1 となるように決めた。図 4.3 に流体識別子および体積占有率の定義位置を示す。

流体識別子は、当該セル頂点周囲の計算セルにおける体積占有率  $\phi(\mathbf{x}_c)$  の分布状況から、以下のように求める。

$$\Psi_g(\mathbf{x}_g) = \begin{cases} 1 & \text{where } \phi_{\max}(\mathbf{x}_c) = 1 \\ 0 & \text{where } \phi_{\max}(\mathbf{x}_c) \neq 1 \cap \phi_{\min}(\mathbf{x}_c) = 0 \\ 1 & \text{where } \text{other} \end{cases} \quad (4.10)$$

$\phi_{\max}(\mathbf{x}_c)$  および  $\phi_{\min}(\mathbf{x}_c)$  は、セル頂点を共有する計算セルの体積占有率の最大値および最小値である。次式では、1 格子点を共有する計算セルの集合を  $S$  として用いている。2 次元の例であるが、図 4.3 に  $S$  の例を示す。

$$\phi_{\max}(\mathbf{x}_c) = \max_{\mathbf{x}_c \in S} [\phi(\mathbf{x}_c)] \quad (4.11)$$

$$\phi_{\min}(\mathbf{x}_c) = \min_{\mathbf{x}_c \in S} [\phi(\mathbf{x}_c)] \quad (4.12)$$

式 (4.10) による定義により、体積占有率  $\phi$  が 1 となるセルのセル頂点における流体識別子  $\Psi_g$  の値は 1 となる。また、体積占有率  $\phi$  が 0 のセルにおいては、セル頂点の識別子は全て 0 となる。体積占有率  $\phi$  が 1 でも 0 でもないセルのセル頂点は、周囲のセルの体積占有率  $\phi$  によって決められるか、決まらない場合は 1 とした。

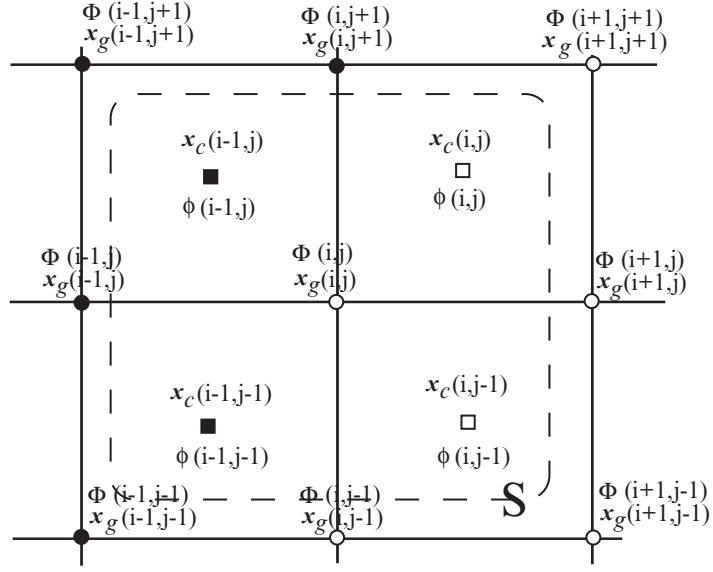


図 4.3: 体積占有率および流体識別子の定義位置

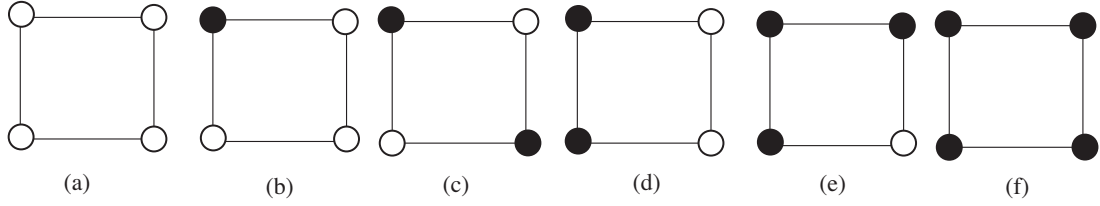


図 4.4: 計算セル各面の流体識別子の分布パターン

## 4.5 計算セルタイプ識別

セル境界における法線ベクトル  $\mathbf{n}_b$  および格子点に定義された流体識別子  $\Psi_g$  に基づき、計算セルタイプを識別する手順について述べる。

計算セル頂点の流体識別子  $\Psi_g$  のパターンを用いて式 (4.13) からセルタイプ  $d$  を識別する。

$$d = d(\Psi_g(\mathbf{x}_g)) \quad (4.13)$$

式 (4.13) によるセルタイプ  $d$  の判別手法の概要は、以下に述べる。まず、計算セルの各境界面に対して以下の流体識別子  $\tilde{\Psi}_g$  を定義する。

$$\tilde{\Psi}_g(B) = \sum_{\mathbf{x}_g \in B} \Psi_g(\mathbf{x}_g) \quad (4.14)$$

ただし、 $B$  はあるセル境界面を構成する矩形平面であり、 $B$  の各頂点における  $\Psi_g$  の値の和をとることを意味する。 $\tilde{\Psi}_g$  の値は、0, 1, 2, 3, 4 のいずれかの値をとる。立方体セルであ

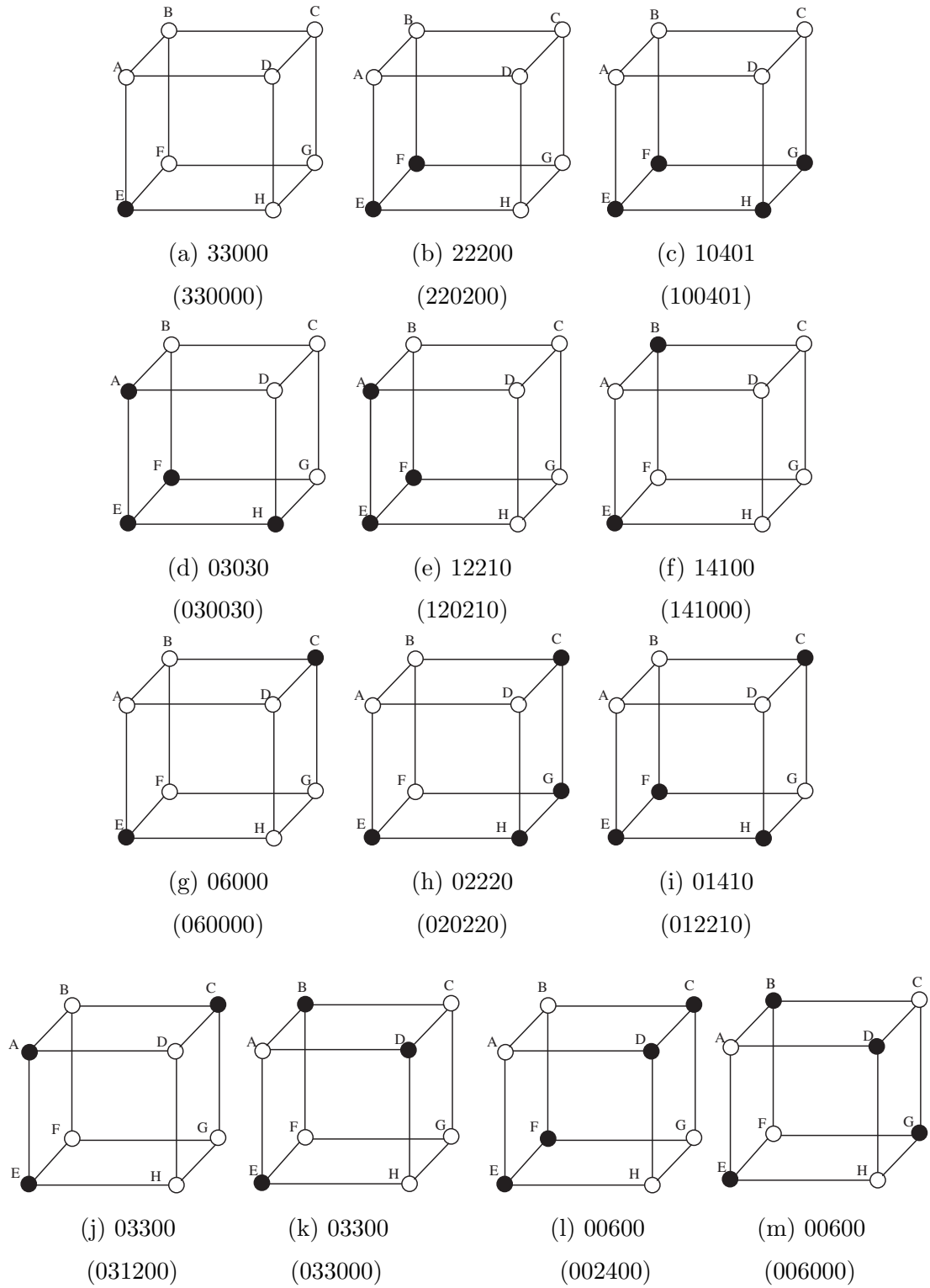


図 4.5: 流体識別子の分布パターンによるセルタイプ

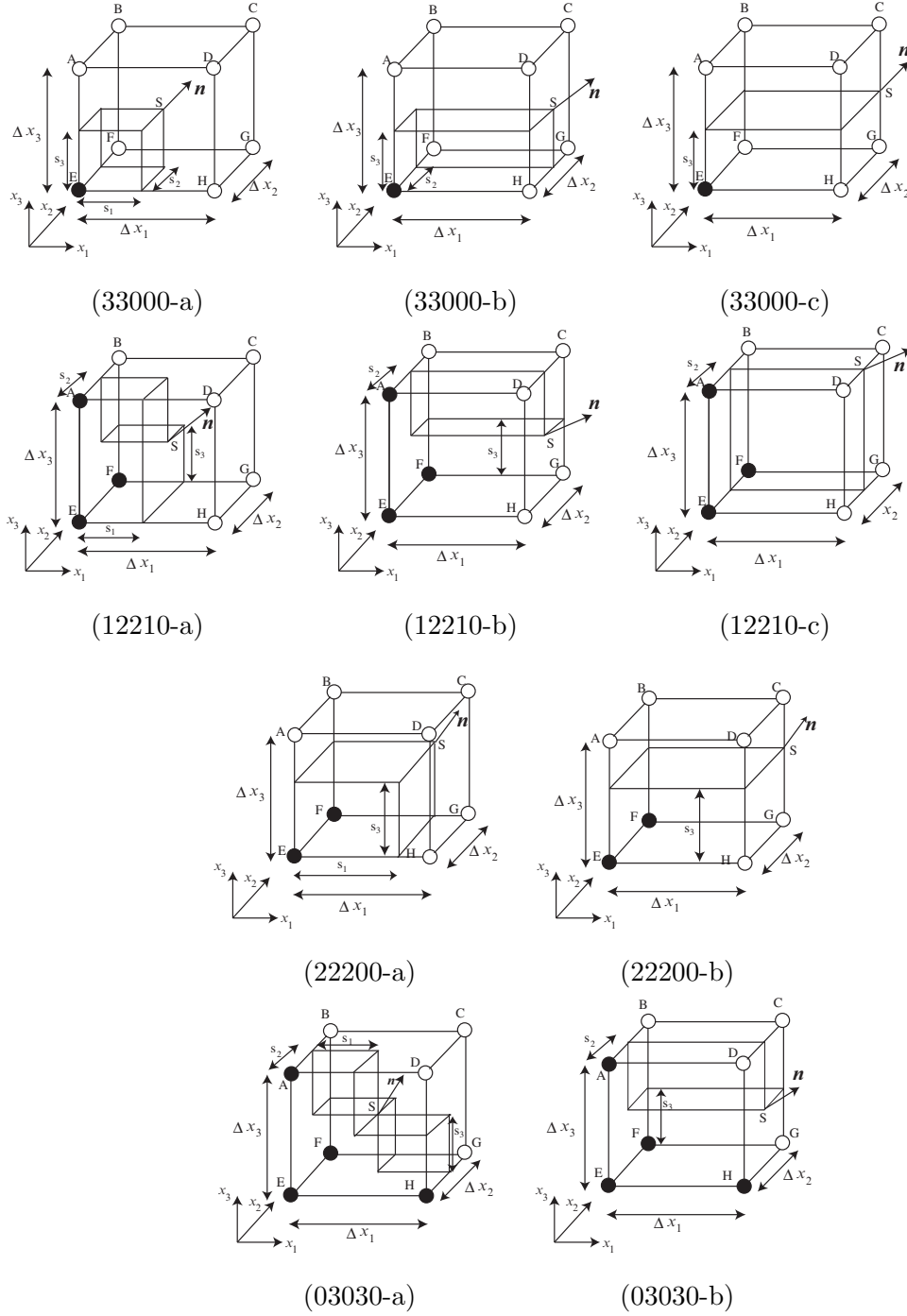


図 4.6: 主なセルタイプに対する界面基本形状

れば、計算セルに対して6つの $\tilde{\Psi}_g$ を得ることができる。 $\tilde{\Psi}_g$ の値が $n$ である面の個数を $\tilde{N}(n)$ で表すと、ベクトル $\tilde{N}$ の5成分のパターンにより、セルタイプ $d$ を $\tilde{N}$ にて識別することが可能である。図4.5には、セルタイプの一覧と対応する $\tilde{N}$ の値を記している。

図4.5の(j),(k),(l),(m)に示されるように、 $\tilde{N}$ で識別できない流体識別子のパターンの組が二組存在しているが、本研究で使用しているパターンは出現率が支配的な限られたパターンのみを考慮しているため、セルタイプ識別に関して問題はない。

ただし、各計算セル境界面に対して流体識別子 $\tilde{\Psi}_g$ ではなく、図4.4に示される流体識別子のパターン(a)から(f)を用いて識別することとすると、セルタイプは完全に識別できる。これは、同じく $\tilde{\Psi}_g = 2$ となるパターンである(c)と(d)が識別可能になることによる。計算セル境界面における流体識別子パターンが $(\hat{n})$ である面の個数を $\hat{N}(\hat{n})$ とすると( $\hat{n} \in \{a, b, c, d, e, f\}$ )、 $\hat{N}$ は6成分を持つベクトルとなり、 $\tilde{N}$ と同様にセルタイプ識別に利用できる。図4.5には括弧付きで $\hat{N}$ の値も併記してある。

$\tilde{N}$ あるいは $\hat{N}$ によるパターンの識別法の有利な点は、パターンの回転や反転に対して柔軟に対応可能であることによる。例えば、パターンに対して回転や軸反転等の操作を施しても、 $\tilde{N}$ あるいは $\hat{N}$ の値は不変である。また、気体と液体が反転した場合には、 $\tilde{N}$ あるいは $\hat{N}$ の成分が反転するのみである。このため、セルタイプの識別においては効果的な方法であると考えられる。

## 4.6 界面基本形状推定および交差線評価

前節において求められた各セルタイプに対して、界面通過位置と可能な限り整合をとれるような界面基本形状を選択し、当該計算セルにおける体積占有率および法線ベクトルと整合をとりながら界面形状を推定する手順について述べる。本節では、前節において計算セルタイプを識別した後の手順を想定しているため、法線ベクトル方向によって変換された局所座標系を用いることに注意する。

界面基本形状は制御点 $S$ の位置座標のみを未知変数としており、体積占有率および法線ベクトルとの整合性を考慮して制御点 $S$ の局所座標 $s$ を最終決定し、界面形状を決定する。界面基本形状は単純な形状のみを想定しているため、制御点 $S$ の座標からセル境界面と界面の交差線 $L$ は容易に求めることができる。本節ではこれらの手順について述べる。

まず、式(4.15)により界面基本形状を推定する。

$$\xi = \xi(\phi, \mathbf{n}_c, d) \quad (4.15)$$



図 4.6(33000-a,b,c) の例では, 界面基本形状  $\xi$  は式 (4.16) によって場合分けされる.

$$\xi(\phi, \mathbf{n}_c, 33000) = \begin{cases} \text{a where} & \phi \leq \phi_{\text{lim}}^0 \\ \text{b where} & \phi_{\text{lim}}^0 \leq \phi \leq \phi_{\text{lim}}^1 \\ \text{c where} & \phi_{\text{lim}}^1 \leq \phi \end{cases} \quad (4.16)$$

ただし,  $\phi_{\text{lim}}^0, \phi_{\text{lim}}^1$  は式 (4.17), 式 (4.18) により得られる.

$$\phi_{\text{lim}}^0 = \frac{n_{c1}^* n_{c2}^* n_{c3}^*}{n_{c\zeta(1)}^*} \quad (4.17)$$

$$\phi_{\text{lim}}^1 = \frac{n_{c1}^* n_{c2}^* n_{c3}^*}{n_{c\zeta(1)}^* n_{c\zeta(2)}^*} \quad (4.18)$$

ただし,  $n_{c1}, n_{c2}, n_{c3}$  はセル中心における法線ベクトルの各成分であり,  $n_{c1}^*, n_{c2}^*, n_{c3}^*$  は次式で示される.

$$n_{c\alpha}^* = \frac{n_{c\alpha}}{\Delta x_\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.19)$$

なお,  $\zeta(1), \zeta(2)$  は 3 成分のうちで絶対値がそれぞれ最大, 2 番目に大きくなる方向を示す指標である.

さらに, それぞれの界面基本形状において体積占有率に基づいて制御点  $S(s_1, s_2, s_3)$  の座標を求めた. 図 4.6(33000-a,b,c) の例では, 式 (4.20) で  $s_\alpha (\alpha = 1, 2, 3)$  を求めた.

$$s_\alpha = \begin{cases} \left( \phi / (n_{c1}^* n_{c2}^* n_{c3}^*) \right)^{1/3} n_{c\alpha} & \phi \leq \phi_{\text{lim}}^0 \\ \min \left[ \sqrt{\frac{\phi}{\phi_{\text{lim}}^0}} \frac{n_{c\alpha}}{n_{c\zeta(1)}^*}, \Delta_\alpha \right] & \phi_{\text{lim}}^0 \leq \phi \leq \phi_{\text{lim}}^1 \\ \min \left[ \sqrt{\frac{\phi}{\phi_{\text{lim}}^1}} \frac{n_{c\alpha}}{n_{c\zeta(2)}^*}, \Delta_\alpha \right] & \phi_{\text{lim}}^1 \leq \phi \end{cases} \quad (4.20)$$

最後に,  $\mathbf{s}$  から各セル境界における交差線  $\mathbf{L}$  を求めた. 例えば, 図 4.6(33000-a) の例では, 面 ADHE における交差線は  $(0, 0, s_3)$  と  $(s_1, 0, 0)$  を結ぶ線分として求めた. 具体的には,  $L_\beta^{0\alpha}$  を  $\alpha$  軸方向に垂直なセル境界面のうち, 局所座標原点を通る面内を通る交差線ベクトルの  $\beta$  成分であるとする, 式 (4.21) の通りに求められる.

$$L_\beta^{0\alpha} = \hat{e}_\beta^\alpha s_\beta \quad (4.21)$$

ただし,  $\hat{e}^\alpha$  は以下に定義する.

$$\hat{e}^\alpha = [1, 1, 1]^T \times [\delta_{1\alpha}, \delta_{2\alpha}, \delta_{3\alpha}]^T \quad (4.22)$$

セルタイプ 33000 の場合には,  $\mathbf{L}^{01}, \mathbf{L}^{02}, \mathbf{L}^{03}$  のみ求めることができれば十分である.

同様に、図 4.6(12210-a,b,c) の例では、界面基本形状  $\xi$  は式 (4.23) によって場合分けされる。

$$\xi(\phi, \mathbf{n}_c, 12210) = \begin{cases} \begin{cases} \text{a where } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^2 & \text{if } \zeta(1) = \zeta(\perp) \\ \text{b where } \phi_{\text{lim}}^2 \leq \phi \end{cases} \\ \begin{cases} \text{a where } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^3 & \text{if } \zeta(1) \neq \zeta(\perp) \\ \text{c where } \phi_{\text{lim}}^3 \leq \phi \end{cases} \end{cases} \quad (4.23)$$

ただし、 $\phi_{\text{lim}}^2, \phi_{\text{lim}}^3$  は式 (4.24), 式 (4.25) により得られる。なお、 $\zeta(\perp)$  は同一値の流体識別子を有する 3 頂点から構成される平面に垂直な方向を示す指標である。

$$\phi_{\text{lim}}^2 = \frac{n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(1)}^* + n_{c\zeta(3)}^* n_{c\zeta(1)}^* - n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(3)}^*}{n_{c\zeta(1)}^{*2}} \quad (4.24)$$

$$\phi_{\text{lim}}^3 = \frac{n_{c\zeta(\perp)}^*}{n_{c\zeta(1)}^*} \quad (4.25)$$

さらに、それぞれの界面基本形状において体積占有率に基づいて制御点  $S(s_1, s_2, s_3)$  の座標を求めた。図 4.6(12210-a,b,c) の例では、式 (4.26) で  $s_\alpha (\alpha = 1, 2, 3)$  を求めた。

$$s_\alpha = \min[\Delta x_\alpha, \theta n_{c\alpha}] \quad (4.26)$$

として体積占有率  $\phi$  から未知定数  $\theta$  を求める式は、高々 3 次の代数方程式となる。

$$a_3 \theta^3 + a_2 \theta^2 + a_1 \theta + a_0 = 0 \quad (4.27)$$

係数  $a_i$  については、次式に示す。

$$\begin{bmatrix} a_3 \\ a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{bmatrix}^T = \begin{cases} \begin{cases} [-n_{c1}^* n_{c2}^* n_{c3}^*, n_{c\zeta(1)}^* (n_{c\zeta(2)}^* + n_{c\zeta(3)}^*), 0, -\phi] & \text{if } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^2 \cap \zeta(1) = \zeta(\perp) \\ [0, -n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(3)}^*, n_{c\zeta(2)}^* + n_{c\zeta(3)}^*, -\phi] & \text{if } \phi_{\text{lim}}^2 \leq \phi \cap \zeta(1) = \zeta(\perp) \end{cases} \\ \begin{cases} [-n_{c1}^* n_{c2}^* n_{c3}^*, n_{c\zeta(1)}^* (n_{c\zeta(2)}^* + n_{c\zeta(3)}^*), 0, -\phi] & \text{if } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^3 \cap \zeta(1) \neq \zeta(\perp) \\ [0, 0, n_{c\zeta(\perp)}^*, -\phi] & \text{if } \phi_{\text{lim}}^3 \leq \phi \cap \zeta(1) \neq \zeta(\perp) \end{cases} \end{cases} \quad (4.28)$$

最後に、 $\mathbf{s}$  から各セル境界における交差線  $\mathbf{L}$  を求めた。セルタイプ 12210 においては、 $\mathbf{L}^{1\zeta(\perp)}$  以外を定義する必要がある。具体的には、式 (4.21) と同様な考え方で以下の通りに求められる。

$$L_\beta^{\gamma\alpha} = \begin{cases} \hat{e}_\beta^\alpha s_\beta & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 1 \\ \delta_{\beta\zeta(\alpha,\perp)(1)} \Delta x_\beta & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 2 \\ \hat{e}_\beta^\alpha (\Delta x_\beta - s_\beta) & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 3 \end{cases} \quad (4.29)$$

ただし、 $\gamma = 0, 1$  であり、0 は局所座標原点側の計算セル境界面、1 は原点と反対側の計算セル境界面を示す。 $B^{\gamma\alpha}$  は、 $\alpha$  軸に垂直な計算セル境界面であり、 $\gamma$  の値によって当該セル局

所座標の原点側であるかその反対側であるかを示す.  $\overline{\zeta(\alpha, \perp)}$  は,  $\zeta(\alpha, \perp) \equiv \{\zeta(\alpha), \zeta(\perp)\}$  としたとき,  $\overline{\zeta(\alpha, \perp)} = \{1, 2, 3\} - \zeta(\alpha, \perp)$  で得られる.  $\overline{\zeta(\alpha, \perp)}(i)$  は,  $\zeta \in \overline{\zeta(\alpha, \perp)}$  のうち,  $n_{c\zeta}$  の絶対値が  $i$  番目に大きなものであることを示す.  $\tilde{\Psi}_g$  は, 式 (4.14) にて定義される計算セル境界面  $B$  における流体識別子和である.

同様に, 図 4.6(22200-a,b) の例では, 界面基本形状  $\xi$  は式 (4.30) によって場合分けされる.

$$\xi(\phi, n_c, 22200) = \begin{cases} \text{a where } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^4 \\ \text{b where } \phi_{\text{lim}}^4 \leq \phi \end{cases} \quad (4.30)$$

ただし,  $\phi_{\text{lim}}^4$  は式 (4.31) により得られる.

$$\phi_{\text{lim}}^4 = \frac{n_{\overline{\zeta(\parallel)}(2)}^*}{n_{\overline{\zeta(\parallel)}(1)}^*} \quad (4.31)$$

なお,  $\zeta(\parallel)$  は同一値の流体識別子を有する 2 頂点から構成される直線に平行な方向を示す指標である.  $\overline{\zeta(\parallel)}$  は,  $\overline{\zeta(\alpha, \perp)}$  と同様に,  $\overline{\zeta(\parallel)} = \{1, 2, 3\} - \zeta(\parallel)$  で得られ,  $\overline{\zeta(\parallel)}(i)$  は  $\zeta \in \overline{\zeta(\parallel)}$  のうち,  $n_{c\zeta}$  の絶対値が  $i$  番目に大きなものであることを示す.

さらに, それぞれの界面基本形状において体積占有率に基づいて制御点  $S(s_1, s_2, s_3)$  の座標を求めた. 図 4.6(22200-a,b) の例では, 式 (4.32) で  $s_\alpha (\alpha = 1, 2, 3)$  を求めた.

$$s_\alpha = \begin{cases} \sqrt{\frac{\phi}{\phi_{\text{lim}}^4} \frac{n_{c\alpha}}{n_{\overline{\zeta(\parallel)}(1)}^*}} & \phi \leq \phi_{\text{lim}}^4 \\ \min\left[\frac{\phi}{\phi_{\text{lim}}^4} \frac{n_{c\alpha}}{n_{\overline{\zeta(\parallel)}(1)}^*}, \Delta_\alpha\right] & \phi_{\text{lim}}^4 \leq \phi \end{cases} \quad (4.32)$$

最後に,  $s$  から各セル境界における交差線  $L$  を求めた. セルタイプ 22200 においては,  $L^{1\overline{\zeta(\parallel)}(1)}$ ,  $L^{1\overline{\zeta(\parallel)}(2)}$  以外の 4 面で定義する必要がある. 具体的には, 式 (4.21) と同様な考え方で以下の通りに求められる.

$$L_\beta^{\gamma\alpha} = \begin{cases} \hat{e}_\beta^\alpha s_\beta & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 1 \\ \delta_{\beta\zeta(\parallel)} \Delta x_\beta & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 2 \end{cases} \quad (4.33)$$

同様に, 図 4.6(03030-a,b) の例では, 界面基本形状  $\xi$  は式 (4.34) によって場合分けされる.

$$\xi(\phi, n_c, 03030) = \begin{cases} \text{a where } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^5 \\ \text{b where } \phi_{\text{lim}}^5 \leq \phi \end{cases} \quad (4.34)$$

ただし,  $\phi_{\text{lim}}^5$  は式 (4.35) により得られる.

$$\phi_{\text{lim}}^5 = \frac{n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(1)}^* + n_{c\zeta(3)}^* n_{c\zeta(1)}^* - n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(3)}^*}{n_{c\zeta(1)}^{*2}} \quad (4.35)$$

さらに、それぞれの界面基本形状において体積占有率に基づいて制御点  $S(s_1, s_2, s_3)$  の座標を求めた。図 4.6(03030-a,b) の例では、式 (4.36) で  $s_\alpha (\alpha = 1, 2, 3)$  を求めた。

$$s_\alpha = \min[\Delta x_\alpha, \theta n_{c\alpha}] \quad (4.36)$$

として体積占有率  $\phi$  から未知定数  $\theta$  を求める式は、高々 3 次の代数方程式となる。

$$a_3\theta^3 + a_2\theta^2 + a_1\theta + a_0 = 0 \quad (4.37)$$

係数  $a_i$  については、次式に示す。

$$\begin{bmatrix} a_3 \\ a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{bmatrix}^T = \begin{cases} [-2n_{c1}^* n_{c2}^* n_{c3}^*, n_{c\zeta(1)}^* n_{c\zeta(2)}^* + n_{c\zeta(3)}^* n_{c\zeta(1)}^* + n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(3)}^*, 0, -\phi] & \text{if } \phi \leq \phi_{\text{lim}}^5 \\ [0, -n_{c\zeta(2)}^* n_{c\zeta(3)}^*, n_{c\zeta(2)}^* + n_{c\zeta(3)}^*, -\phi] & \text{if } \phi_{\text{lim}}^5 \leq \phi \end{cases} \quad (4.38)$$

最後に、 $s$  から各セル境界における交差線  $L$  を求めた。セルタイプ 03030 においては、全ての境界面で  $L$  を定義する必要がある。具体的には、式 (4.21) と同様な考え方で以下の通りに求められる。

$$L_\beta^{\gamma\alpha} = \begin{cases} \hat{e}_\beta^\alpha s_\beta & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 1 \\ \hat{e}_\beta^\alpha (\Delta x_\beta - s_\beta) & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 3 \end{cases} \quad (4.39)$$

最後に、セルタイプ 10401 の例では界面基本形状での場合分けは生じない。式 (4.40) により界面基本形状および体積占有率に基づいて制御点  $S(s_1, s_2, s_3)$  の座標を求めた。式 (4.20) で  $s_\alpha (\alpha = 1, 2, 3)$  を求めた。

$$L_\beta^{\gamma\alpha} = \begin{cases} \delta_{\beta\overline{\zeta(\alpha, \perp)}(1)} \Delta x_\beta & \text{where } \tilde{\Psi}_g(B^{\gamma\alpha}) = 2 \end{cases} \quad (4.40)$$

なお、 $\zeta(\perp)$  は同一値の流体識別子を有する 4 頂点から構成される平面に垂直な方向を示す指標であり、 $\overline{\zeta(\alpha, \perp)}$  は、先に述べられた通りの定義である。

本手法にて界面張力評価の対象とし、交差線算出の対象としたセルタイプは以上の通りである。交差線が  $L$  であるとする、接線方向ベクトル  $t$  はセル境界における法線ベクトルと交差線ベクトルの外積によって求められるため、表面張力は式 (4.6) で得られる。また、セル境界面における表面張力の和をとることによって、セル体積に働く表面張力を得ることができる。

$$f_s = \sum T \quad (4.41)$$

## 4.7 検証計算

### 4.7.1 CSF モデルの適用

本研究では既往手法である CSF モデルを次の手順で実装した．図 4.7 に 2 次元平面領域における変数配置を示す．

- 計算セル境界における軸方向局所勾配の計算
- 計算セル境界における局所勾配の内挿
- 計算セル中心における法線ベクトルの計算
- 計算セル中心法線ベクトル発散の計算
- 計算セル中心表面張力計算

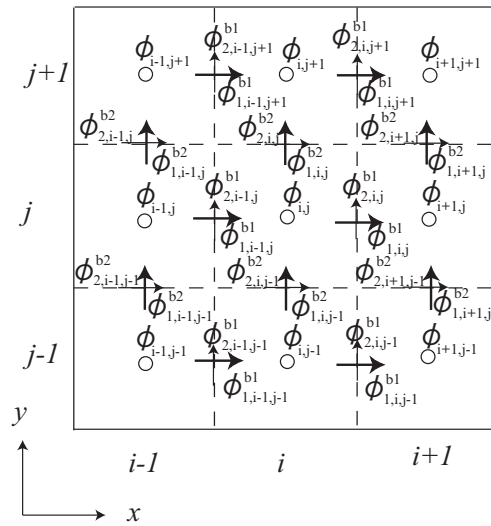


図 4.7: 2 次元平面領域における変数配置

まず，計算セル境界面に対する法線方向局所勾配の計算を次式にて行う．

$$\phi_{\alpha,i,j,k}^{b\alpha} = \frac{\phi_{i+\delta_{1\alpha},j+\delta_{2\alpha},k+\delta_{3\alpha}} - \phi_{i,j,k}}{\Delta x_{\alpha}} \quad (4.42)$$

$\phi_{\beta,i,j,k}^{b\alpha}$  は，法線方向が  $\alpha$  方向である  $i, j, k$  番目の計算セル境界面における  $\beta$  方向の局所勾配である．次に各計算セル境界面に対する接線方向局所勾配を式 (4.42) によって得られた

法線方向局所勾配を内挿することによって求めた,

$$\begin{aligned} \phi_{\beta,i,j,k}^{b\alpha} = & \frac{1}{8} \left( \phi_{\beta,i,j,k}^{b\beta} + \phi_{\beta,i,j+\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k}^{b\beta} + \phi_{\beta,i,j,k+\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}}^{b\beta} + \phi_{\beta,i,j+\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k+\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}}^{b\beta} \right. \\ & + \phi_{\beta,i+\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j,k}^{b\beta} + \phi_{\beta,i+\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j+\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k}^{b\beta} + \phi_{\beta,i+\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j,k+\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}}^{b\beta} \\ & \left. + \phi_{\beta,i+\delta_{1\alpha}-\delta_{1\beta},j+\delta_{2\alpha}-\delta_{2\beta},k+\delta_{3\alpha}-\delta_{3\beta}}^{b\beta} \right) \end{aligned} \quad (4.43)$$

ただし,  $\alpha \neq \beta$  である. 式 (4.42) および式 (4.43) において各セル境界面における各方向の局所勾配が得られたため, これらを各セル毎に平均することで計算セルにおける法線ベクトルを得る.

$$n_{\alpha,i,j,k}^c = \frac{1}{6} \sum_{\beta=1}^3 \left( \phi_{\alpha,i-\delta_{1\beta},j-\delta_{2\beta},k-\delta_{3\beta}}^{b\beta} + \phi_{\alpha,i,j,k}^{b\beta} \right) \quad (4.44)$$

また, 次式にて計算セル境界面における法線ベクトルを正規化する.

$$\hat{\phi}_{\alpha,i,j,k}^{b\beta} = \frac{\phi_{\alpha,i,j,k}^{b\beta}}{|\phi_{i,j,k}^{b\beta}|} \quad (4.45)$$

正規化された法線ベクトルを用いて法線ベクトルの発散を次式で得る.

$$\nabla \cdot n_{i,j,k}^c = \sum_{\beta=1}^3 \frac{\hat{\phi}_{\beta,i,j,k}^{b\beta} - \hat{\phi}_{\beta,i-\delta_{1\beta},j-\delta_{2\beta},k-\delta_{3\beta}}^{b\beta}}{\Delta x_{\beta}} \quad (4.46)$$

計算セル中心における表面張力  $f^s$  は次式で得られる.

$$f_{i,j,k}^s = \sigma (\nabla \cdot n_{i,j,k}^c) n_{i,j,k}^c \quad (4.47)$$

ただし,  $\sigma$  は表面張力係数である.

なお CSF モデルの使用に当たっては, 移流計算後の識別関数に対して次式に示される拡散操作を適用して得られたものに適用することとし, 拡散操作の繰り返し回数や拡散係数  $c$  を変化させて使用した.

$$\phi_{i,j}^{n+1} = c(\phi_{i+1,j}^n + \phi_{i-1,j}^n + \phi_{i,j+1}^n + \phi_{i,j-1}^n - 4\phi_{i,j}^n) \quad (4.48)$$

$n$  は拡散操作の繰り返しステップ数である.

#### 4.7.2 曲率の再現性の検証

本手法の妥当性および有効性を検証する一つの例題として, 正方形領域内の円形の境界面に対して曲率を求め, CSF モデルを用いて得られるものと比較した. 計算領域は一辺 20cm の正方形領域とし, その中心に直径 10cm の円形の境界面が存在している. 図 4.8

に、本手法および CSF モデルから得られる境界面の曲率と曲率計算に使用した体積占有率の空間分布を計算領域中心を通る断面に沿ってプロットした。計算に使用した計算格子は  $40 \times 40$  の正方格子である。理論的に得られる曲率は 0.2 であるが、両手法ともほぼ理論と一致する曲率を得ている。図 4.8(a), (b) により、本手法では表面張力評価に要する領域として必要な計算セル数が CSF モデルのものと比較して少なく、1 セルであることが示されている。

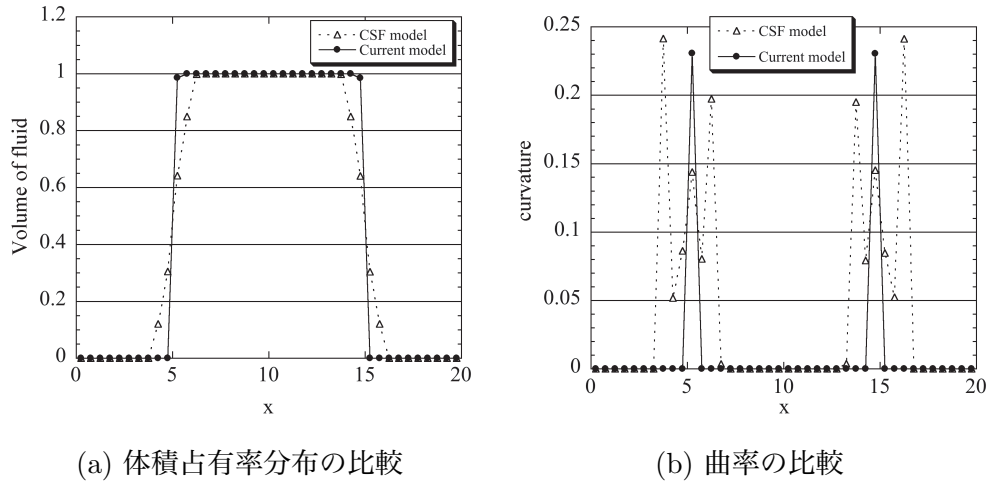


図 4.8: 円形境界面に対する曲率および体積占有率分布の比較

### 4.7.3 ラプラス則再現計算

提案手法の妥当性を確認する目的で、静止流体中の球形の液滴内外の圧力差  $\Delta p$  を数値計算によって求め、ラプラス則  $\Delta p = 2\sigma/r$  によって予測される理論解と比較した。計算領域は一辺  $L_m$  の立方体形状とし、立方体の中心に直径  $L/2$  の球形の液滴を配置し、表面張力との釣り合いによって発生する液滴内外の圧力差  $\Delta p$  を求めた。計算領域は  $20 \times 20 \times 20$  の計算セルに分割した。なお、液滴内の圧力  $P_0$  および液滴外の圧力  $P_1$  は体積占有率  $\phi$  によって次の式で求めた。

$$P_0 = \frac{1}{N_0} \sum_{\phi(\mathbf{x}_c) \geq 0.95} \phi(\mathbf{x}_c) \quad (4.49)$$

$$P_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{\phi(\mathbf{x}_c) \leq 0.05} \phi(\mathbf{x}_c) \quad (4.50)$$

$$\Delta p = P_0 - P_1 \quad (4.51)$$

ここに、 $N_0, N_1$  はそれぞれ  $\phi \geq 0.95, \phi \leq 0.05$  を満たすセルの数である。図 4.9 の横軸は曲率、縦軸は圧力差  $\Delta p$  を示す。実線は次式で示されるラプラス則によって得られる理論

解，クロス印は数値計算によって得られた圧力差である．なお，表面張力係数は  $0.01\text{N/m}$  とした．理論解と数値計算によって得られた値は曲率の値の広い範囲にわたって良く一致している．

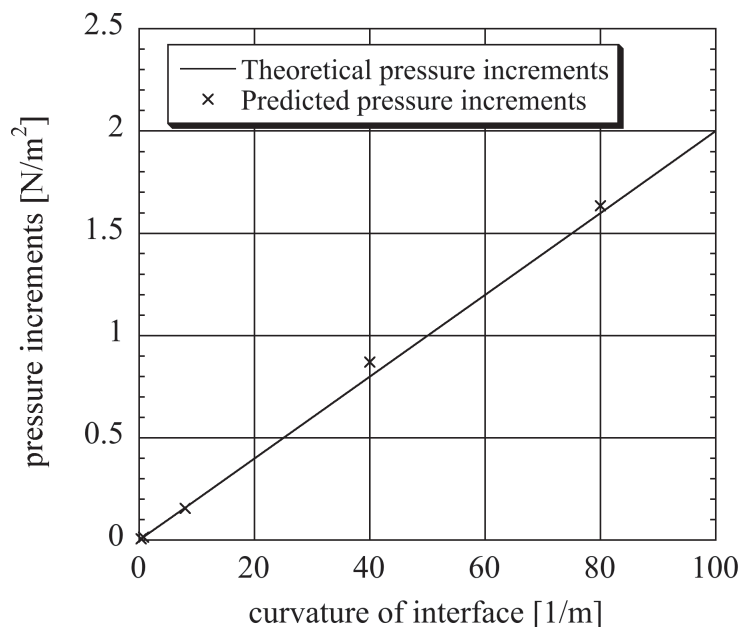


図 4.9: 界面曲率と球体液滴内外での圧力差の関係

## 4.8 章のまとめ

本章では，気液混相流れの数値計算に用いるために界面形状分類に基づく表面張力評価法を提案した．提案された手法は，CSF モデルのように数セル分の界面領域を必要としないため，より少ないセル数で，気泡および液滴周りの表面張力を評価できる．

また，提案手法は表面張力をセル内の微小界面周囲に働く力として直接評価するため，界面形状の曲率を算出する必要がない．セル内の界面形状はセル頂点の流体識別子，体積占有率および法線ベクトルから推定するが，表面張力評価に直接用いられるのは推定界面と計算セル境界の交差線位置と延長であることに注意する．

提案手法の基礎的な検証として曲率の再現性や球形液滴の周囲に発生する圧力ジャンプの再現性について数値計算を行い，概ね妥当な結果を得た．

第 5 章第 2 節においては，本章の提案手法を用いて様々な気液混相流れへの適用結果を示す．



## 参考文献

- [1] Hirt C.W. and Nichols B.D. Volume of fluid (VOF) methods for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, Vol. 39, pp. 201–225, 1981.
- [2] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 335–354, 1992.
- [3] C. de. Boor. *A Practical Guide to Splines*. Springer-Verlag, New York, 1967.

## 第5章 気液混相流れへの適用

本章では AND フィルタおよび 3 次元 PLIC 法を気液混相流数値計算に適用し、それぞれの界面捕捉法の有効性を確かめた。

AND フィルタおよび 3 次元 PLIC 法の移流計算における精度検証は第 2 章および第 3 章にて既に検討されているため、本章では気液混相流数値計算のみを行った。

第 5.1 節においては、表面張力効果の無視できる重力支配の気液混相流数値計算例を示す。

第 5.2 節においては、表面張力効果が無視できない気液混相流数値計算例を示す。

本章を通じて流体計算には、MICS [1] を用いており、予測段階における C-ISMALC 法 [2] における  $\alpha, \beta$  は共に 1.0 とし、完全陰解法とした。なお、AND フィルタを用いた計算においては移流スキームとして 5 次 TVD スキーム [3] を用いている。本章の数値計算は特に断りのない限り京都大学学術情報メディアセンターの SPARC Enterprise M9000 FAT システム (ノード数 7, コア数 128×7, ピーク性能 8.96Tflops, メモリ容量 1TB×7) を用いて行った。

### 5.1 重力が支配的な気液混相流数値計算例

#### 5.1.1 水柱崩壊問題

##### 下流水深を有しない場合

まず、基本例題として良く用いられる水柱崩壊問題を取り上げる。下流水深を 0 とし、水面下流端位置の時系列を実験値と比較して流体計算手法の妥当性を確認した。

計算領域は  $1.0 \times 0.5 \times 1.0\text{m}^3$  の直方体領域とし、 $50 \times 25 \times 50$  の立方体格子を用いた。並列化に当たっては、全体の計算領域を  $25 \times 25 \times 25$  の小領域に 4 分割した。気相の密度および動粘性係数はそれぞれ  $1.0\text{kg/m}^3$ ,  $1.0 \times 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$  とし、液相の密度および動粘性係数はそれぞれ  $1000.0\text{kg/m}^3$ ,  $1.0 \times 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$  とした。重力加速度は鉛直方向に  $-9.8\text{m/s}^2$  としている。計算の初期状態においては、水柱の幅、高さをそれぞれ 0.2m, 0.4m とした。時間刻みは 0.001s とし、 $t = 0.6\text{s}$  まで計算を行った。水面下流端の位置の時系列を図 5.1 に示す。 $x$  軸の時間  $T$  および  $y$  軸の界面位置  $Z$  はそれぞれ無次元化されており、 $T = \sqrt{2g/at}$ ,

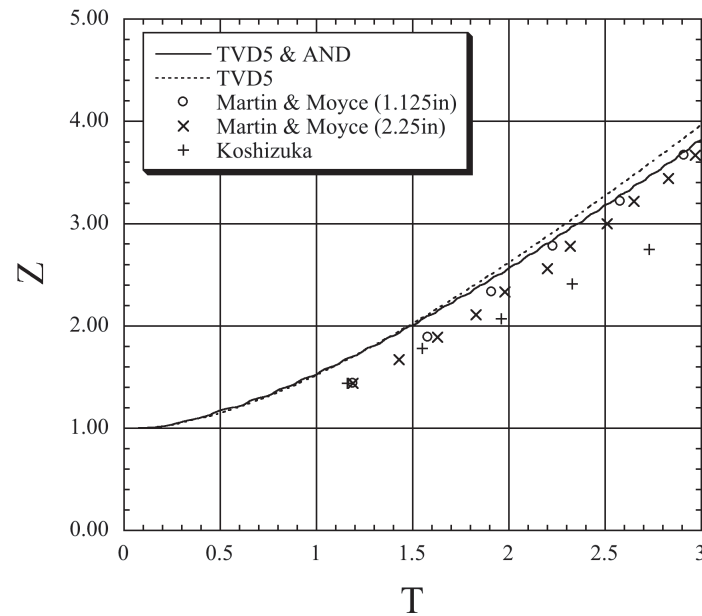


図 5.1: 界面移動距離の時系列比較

$Z = z/a$  である．ここに， $a$  は初期状態における水柱の幅， $g$  は重力加速度， $z$  は水面下流端位置， $t$  は時間である．

図 5.1 には Martin & Moyce [4] および Koshizuka & Oka [5] の実験値の結果を併記しているが概ね一致する結果が得られおり，検証計算自体の妥当性が確認できる．AND フィルタの使用の有無によって計算結果に大きな影響を与えていないが，これは以下の 2 点に関係していると考えられる．一点目は，AND フィルタの効果が現れるのは，数値計算の時間発展とともに識別関数の数値拡散が進行した段階であるため，計算開始直後は AND フィルタの有無による数値計算結果の差が出にくいことである．このため，図 5.1 において計算開始直後から  $T < 1.5$  の領域にて AND フィルタの有無による計算結果の違いが見られないものと考えられる．

二点目は界面位置を識別関数値が 0.5 となる位置として表示しているため，数値拡散が進行して界面幅が広がったとしても，その影響が反映されにくいことが考えられる．

### 下流水深を有する場合

次に，混相流体計算における AND フィルタの有効性を確認するために，気液界面の大変形を伴う数値計算例として下流側に水深を有する水柱崩壊問題を取りあげた．数値計算においては AND フィルタを作用させたケースと AND フィルタを使用しないケースを計

算し、計算に要する CPU 時間および識別関数のコンター図を実験画像 [6] と比較した。また、実験においては初期条件において下流側の水に着色してあるため、水柱崩壊過程においても上流側の水と下流側の水の境界が確認できる。本数値計算においては、上流側の水と下流側の水の境界面の時系列を追跡するために初期条件において下流側に着色した水の体積占有率に相当する識別関数を配置し、識別関数の移流計算によって上下流の水の境界面を追跡した。このとき、識別関数の移流計算に AND フィルタを適用した。

計算領域は  $1.28 \times 0.2 \times 0.2\text{m}$  の直方体領域とし、 $256 \times 40 \times 40$  の立方体格子を用いた。気相と液相の密度および動粘性係数等の諸量は下流水深を有しない水柱崩壊問題の検証計算と同様とした。水柱の幅、高さは既往実験 [6] と同様、 $0.38\text{m}$  および  $0.15\text{m}$  とし、下流水深は  $0.015\text{m}$  である。時間刻みは  $0.001\text{s}$  とし、 $t = 0.6\text{s}$  まで計算を行った。図 5.2-5.5 に、 $t = 0.131, 0.192, 0.261, 0.327, 0.392, 0.456, 0.522\text{s}$  における水面形の比較を示す。

図 5.2-5.5 においては、各時刻ごとに上から AND フィルタを適用しないケース、AND フィルタを適用したケース、AND フィルタを適用したケースにおいて下流側に初期配置された水のみを追跡したケース、既往文献 [6] における実験画像の順に配置した。図 5.2-5.5 において、識別関数の等高線は  $0.05, 0.5, 0.95$  の 3 段階で描画している。これらの等高線の間隔を比較することによって急峻な識別関数勾配を維持する AND フィルタの働きを確認することができる。なお、実験画像と同様、初期状態における水柱の下流側の鉛直面を始点とし、下流方向に  $0.66\text{m}$ 、高さ  $0.11\text{m}$  の領域を示した。

$t = 0.131\text{s}$  および  $t = 0.192\text{s}$  における数値計算結果は、水柱の先端部にキノコ形状の特徴的な水面形を再現しており、改めて流体計算法の妥当性を確認できる。この段階では、AND フィルタの使用の有無による顕著な違いは見られない。実験画像では、下流側の着色された水がキノコ形状の頂点から上流側に向かう流れが確認できるが、計算結果ではそのような流れは確認できない。この原因として、計算領域鉛直方向の計算セル分割数が不足しているため、上流側へ向かう流れを再現できていない可能性が考えられる。

$t = 0.261\text{s}$  における水面形は段波が前方に崩れ始めた状況を示しているが、AND フィルタを適用したケースでは等高線の間隔が初期状態から保たれているのに対し、AND フィルタを適用しないケースでは等高線の間隔が初期状態と比較して広がっていることが確認できる。実験画像では、下流側の着色された水が上流側に流され渦を巻いている様子が確認できる。やや半透明となっている部分では、渦によって上流側の水と下流側の水が混合していると推察される。一方、数値計算結果では下流側の水と上流側の水の混合は見られなかった。

$t = 0.327\text{s}$  においては、前方に崩れた波の先端が下流側の水面に接し、空気を巻き込んでいる状況であり、AND フィルタを適用したケースではこれらの特徴を捉えた水面形を表している。また、等高線間隔に広がりが見られない。AND フィルタを適用しないケー

表 5.1: CPU 時間と質量変化の比較 (水柱崩壊)

	CPU 時間	質量変化 (%)
AND フィルタあり	1.156	$8.48 \times 10^{-4}$
AND フィルタなし	1.0	$8.90 \times 10^{-13}$

スでは波の先端と水面の接触部および上流側の広い範囲にわたって等高線間隔に広がり方が確認できる。

$t = 0.392\text{s}$ ,  $t = 0.457\text{s}$ ,  $t = 0.522\text{s}$  においては, AND フィルタを適用しないケースでは波の先端部と水面の接触部を始め, 上流側の広い範囲において識別関数の数値拡散が拡大し水面形の判別が困難であるが, AND フィルタを適用したケースでは界面付近の数値拡散は見られず, 実験画像とほぼ同様の水面形状が得られた。また, 実験画像では上流側の水と下流側の水の混合が進み, 全体的に薄い着色部分の領域が増えるが, 濃い着色部分の形状は, 数値計算結果がよく再現しているものと考えられる。

全体的に数値計算による結果の方が波の位置が前方に寄っているが, この原因として実験における仕切り板除去の影響が考えられる。

また, 表 5.1 に示される通り計算終了時 ( $t=0.6\text{s}$ ) における計算開始時からの液相の質量の増減分は,  $8.48 \times 10^{-4}\%$  の減少であった。AND フィルタを導入したことによる流体計算全体の CPU 時間の増加率は,  $15.6\%$  であった。ただし, 本計算は京都大学学術情報メディアセンターの CRAY XE6 システム A (ノード数 940, コア数  $32 \times 940$ , ピーク性能  $300.8\text{Tflops}$ , メモリ容量  $57\text{TB}$ ) を用いて行った。

### 5.1.2 様々なスロッシング現象

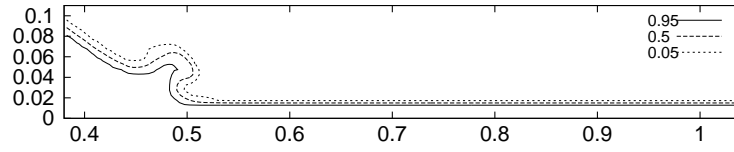
#### 完全流体におけるスロッシング

AND フィルタの気液混相流れへの適用性を確かめるために, 矩形水槽内の完全流体のスロッシングを数値計算し, 理論解と比較した。識別関数の移流計算には 5 次の TVD スキーム [3] および 1 次風上差分を用い, それぞれのケースに対して AND フィルタを適用し, その効果を確認した。微小振幅波理論によると, 波高が水深に比べて十分に小さく流体の粘性が無視できる場合, 静水位からの水位変位  $\Delta\eta$  は以下の式で表現される。

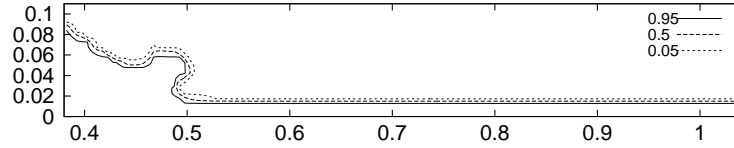
$$\Delta\eta(t, x) = \frac{H}{2} \cos(kx) \cos(\omega t) \quad (5.1)$$

ここに,  $H$  は波高,  $k$  は波数,  $\omega$  は角周波数,  $t$  は時刻,  $x$  は波の進行方向に沿った座標である。

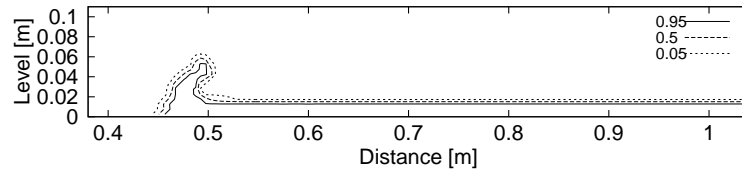
AND フィルタ無し  
(5 次 TVD のみ)



AND フィルタあり  
(5 次 TVD+AND)



AND フィルタあり  
(下流側のみ)

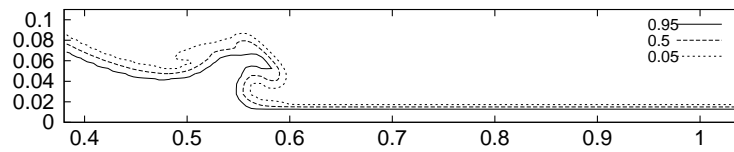


実験画像 [6]

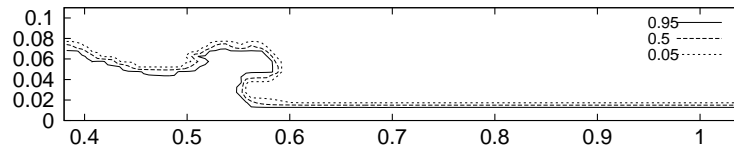


(a)  $t=0.131s$

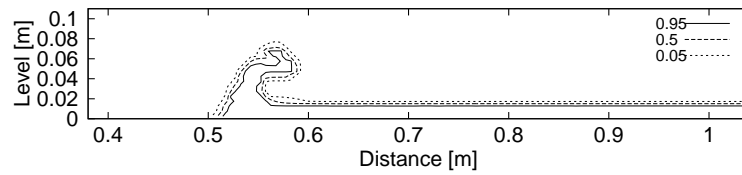
AND フィルタ無し  
(5 次 TVD のみ)



AND フィルタあり  
(5 次 TVD+AND)



AND フィルタあり  
(下流側のみ)



実験画像 [6]



(b)  $t=0.192s$

図 5.2: 水柱崩壊問題における界面位置の経時変化 (1)

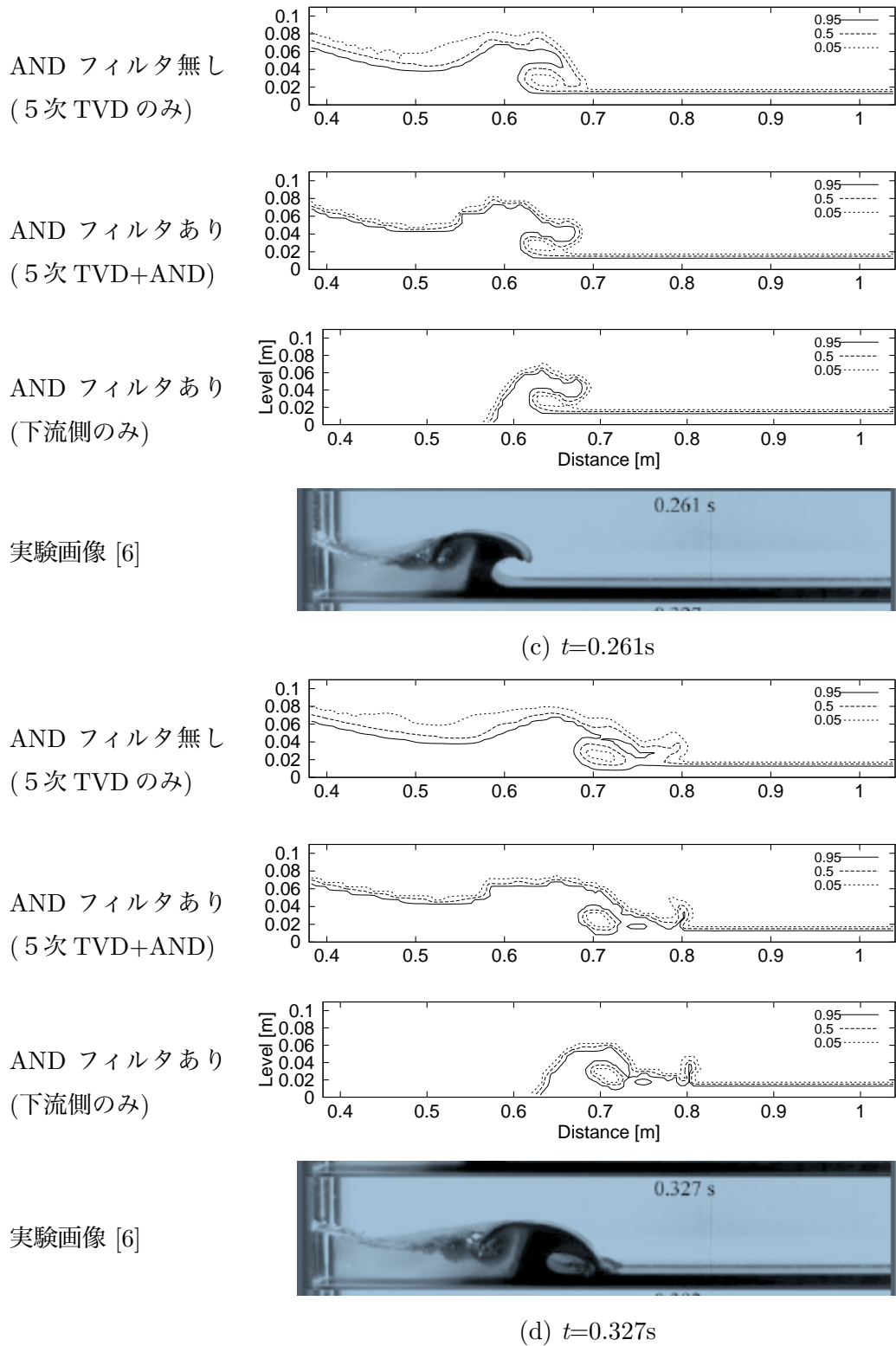


図 5.3: 水柱崩壊問題における界面位置の経時変化 (2)

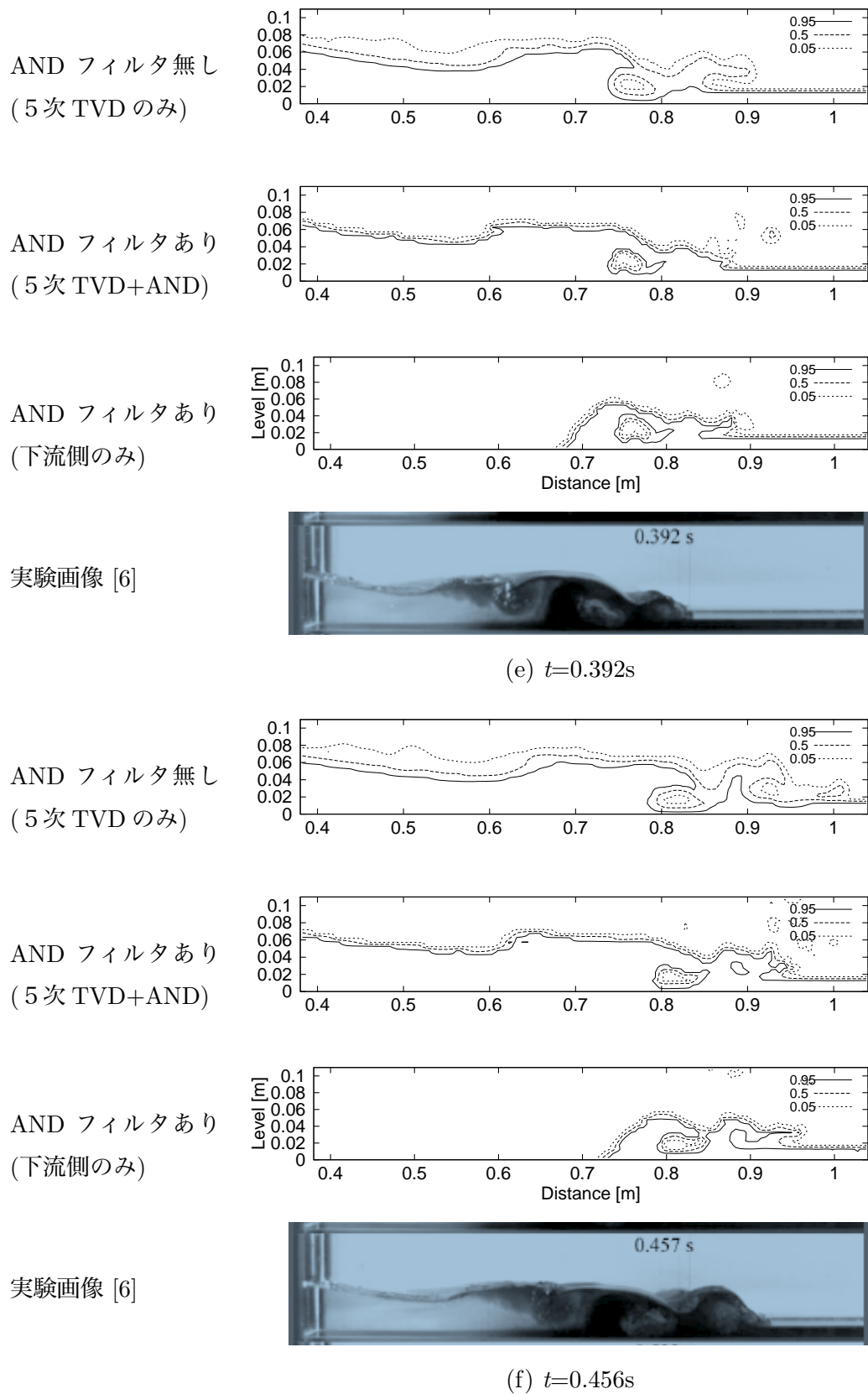
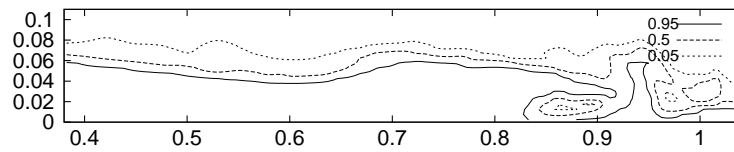


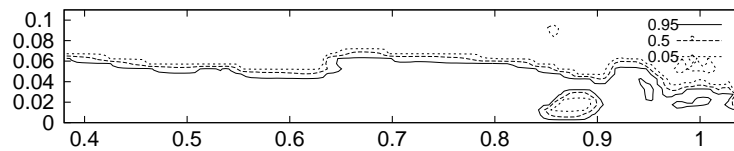
図 5.4: 水柱崩壊問題における界面位置の経時変化 (3)



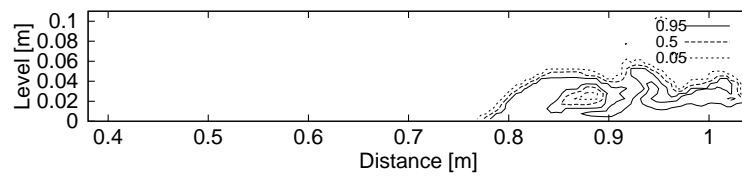
AND フィルタ無し  
(5次 TVD のみ)



AND フィルタあり  
(5次 TVD+AND)



AND フィルタあり  
(下流側のみ)



実験画像 [6]



(g)  $t=0.522s$

図 5.5: 水柱崩壊問題における界面位置の経時変化 (4)

以下では  $0.5 \times 0.5 \times 1.0 \text{m}^3$  のサイズの直方体水槽内に生じる微小振幅波を対象として検証計算を行った。計算領域は  $16 \times 16 \times 32$  の立方体セルに分割した。

初期状態 ( $t = 0\text{s}$ ) では水槽に静水位  $h = 0.5\text{m}$  の完全流体が入っているものとし、位置  $x$  における初期水位  $\eta(0, x)$  を次式で与えた。

$$\eta(0, x) = 0.5 + \frac{H}{2} \cos(kx) \quad (5.2)$$

ただし、波高  $H = 0.1\text{m}$ 、波長  $L = 1\text{m}$ 、波数  $k = 2\pi$  とした。

流体の粘性を全て 0 とし、液体の密度を  $1.0 \times 10^3 \text{kg/m}^3$ 、気体の密度を  $1 \text{kg/m}^3$  とした。

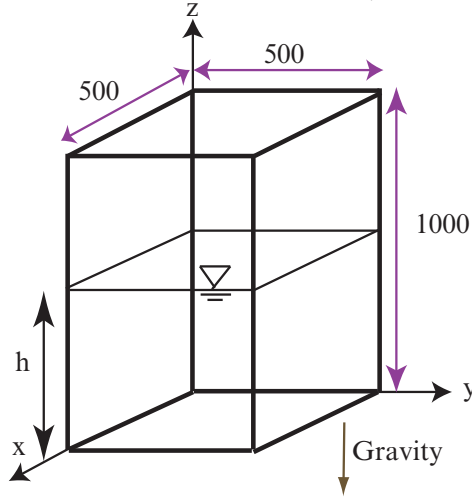


図 5.6: 直方体タンクの諸元 (単位 mm)

誤差を評価するため、時刻  $t$  における識別関数の理論解  $\phi^e(\mathbf{a})$  を式 (5.3) にて定義した。

$$\phi^e(\mathbf{a}) = \begin{cases} 1.0 \cdots \eta(t, x) \geq z^{\text{top}}(\mathbf{a}) \\ 0.0 \cdots \eta(t, x) \leq z^{\text{bot}}(\mathbf{a}) \\ (\eta(t, x) - z^{\text{bot}}(\mathbf{a})) / \Delta z \cdots \text{other} \end{cases} \quad (5.3)$$

ここに、 $\mathbf{a}$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向のセル番号を格納した配列であり、各軸方向のセル番号をそれぞれ  $i_x, i_y, i_z$  とした場合、 $\mathbf{a} = (i_x, i_y, i_z)$  である。 $z^{\text{top}}(\mathbf{a}), z^{\text{bot}}(\mathbf{a})$  はそれぞれセル  $\mathbf{a}$  の  $z$  軸方向正方向、負方向のセル境界の  $z$  座標値である。 $\Delta z$  は、 $z^{\text{top}}(\mathbf{a})$  と  $z^{\text{bot}}(\mathbf{a})$  の差である。式 (5.3) にて定義された  $\phi^e(\mathbf{a})$  を用いて誤差 Error を式 (5.4) にて定義した。

$$\text{Error} = \sum_V |\phi^e(\mathbf{a}) - \phi(\mathbf{a})| \Delta V(\mathbf{a}) \quad (5.4)$$

ここに、 $\sum_V$  は計算領域全体で和を取ることを意味する。 $\phi^e(\mathbf{a})$  は、当該セルの理論的識別関数値であり、 $\phi(\mathbf{a})$  は、数値計算結果から得られた識別関数値である。 $\Delta V(\mathbf{a})$  は、当該セルの体積である。

また、界面厚さ  $w(\mathbf{b})$  は図 5.7 に示されるように計算セルの識別関数値の線形空間内挿を元に、識別関数の 0.05 および 0.95 の等高線の間隔にて定義した。界面厚さ  $w(\mathbf{b})$  は界面厚さが計算セル幅と比較してどの程度まで広がっているかを示しており、界面幅がセル幅より小さくなるケースにおいては最小値 0.9 となる。

$$w(\mathbf{b}) = \frac{z_{0.05}(\mathbf{b}) - z_{0.95}(\mathbf{b})}{\Delta z} \quad (5.5)$$

ここで、 $z_\alpha(\mathbf{b})$  は  $xy$  平面上において、 $\mathbf{b} = (i, j)$  の位置の計算セル線形内挿によって識別関数が  $\alpha$  の値を持つ高さである。

また、式 (5.5) にて定義される界面厚さ  $w(\mathbf{b})$  の平均値  $w_{\text{ave.}}$  を算出し、計算領域全体平均界面厚さを比較することによって AND フィルタの効果を確認めた。

$$w_{\text{ave.}} = \frac{\sum_S w(\mathbf{b})}{N_x N_y} \quad (5.6)$$

ここに、 $\sum_S$  は水平面全体で和を取ることを示し、 $N_x, N_y$  はそれぞれ  $x, y$  方向のセル数である。

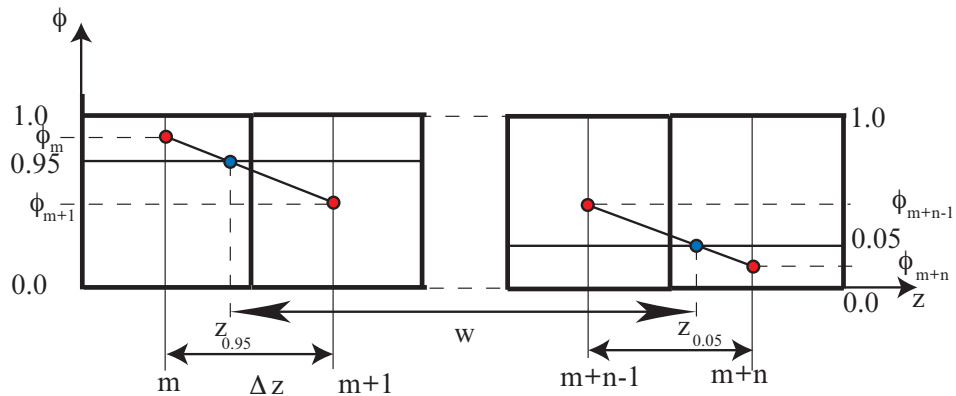


図 5.7: 界面厚さの定義

以上の条件にて  $t = 0\text{s}$  から  $t = 4\text{s}$  まで数値計算を実行し、得られた誤差を図 5.8 に示す。

AND フィルタを使用したケースに比べて、AND フィルタを使用しないケースは時間経過とともに誤差が増加している。これは、数値拡散による影響で界面幅が広がったためと考えられる。一方で、AND フィルタを使用したケースでもある程度の誤差が発生しているが、誤差の上限が抑えられている。ただし、AND フィルタを使用した場合、誤差の増加パターンが単調ではなく、周期的に増減を繰り返しながら緩やかに増加している傾向が特徴的である。

界面厚さについては、図 5.9 に示されるように AND フィルタを適用したケースにおいては薄く保たれていることが確認できる。図 5.10 には、 $x = 0\text{m}$  における界面厚さの上限と下限となる  $z_{0.05}$ ,  $z_{0.95}$  および界面の中心線となる  $z_{0.5}$  の位置の時間変化を示す。5 次 TVD スキームに AND フィルタを適用したケースでは、AND フィルタの効果によって界面の拡散が抑制されていることが確認できる。1 次風上差分に AND フィルタ適用したケースでは、界面幅の拡散を抑制する効果とともに、位相のずれを修正していることが確認できる。

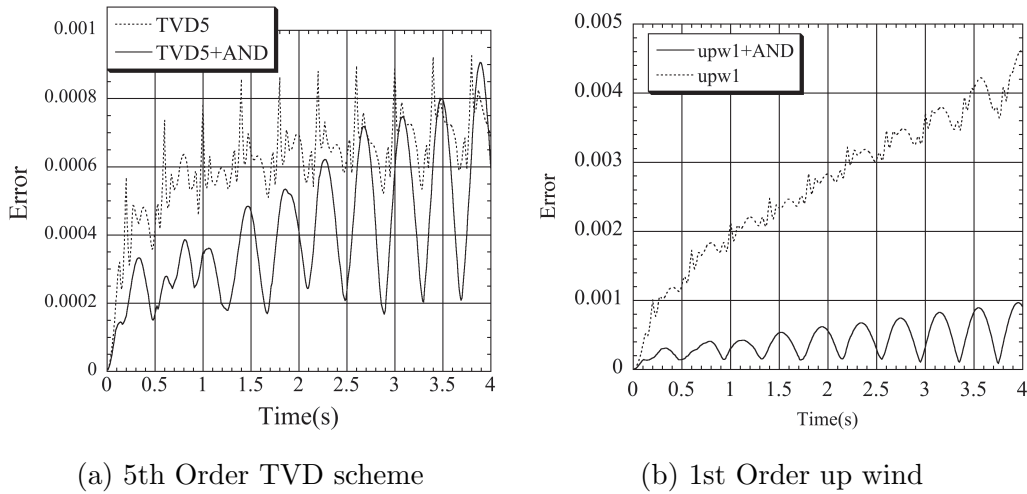


図 5.8: 誤差の時系列 (非粘性流体)

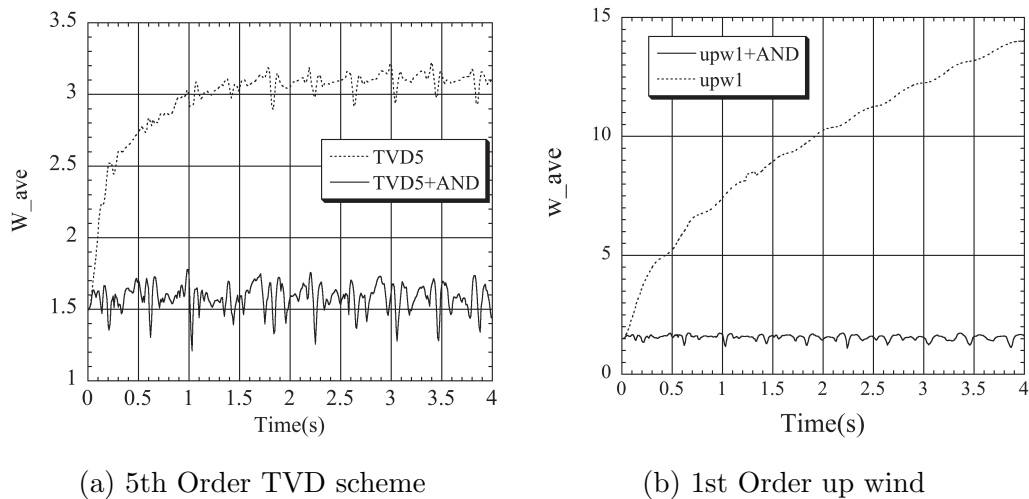


図 5.9: 界面厚さの時系列 (非粘性流体)

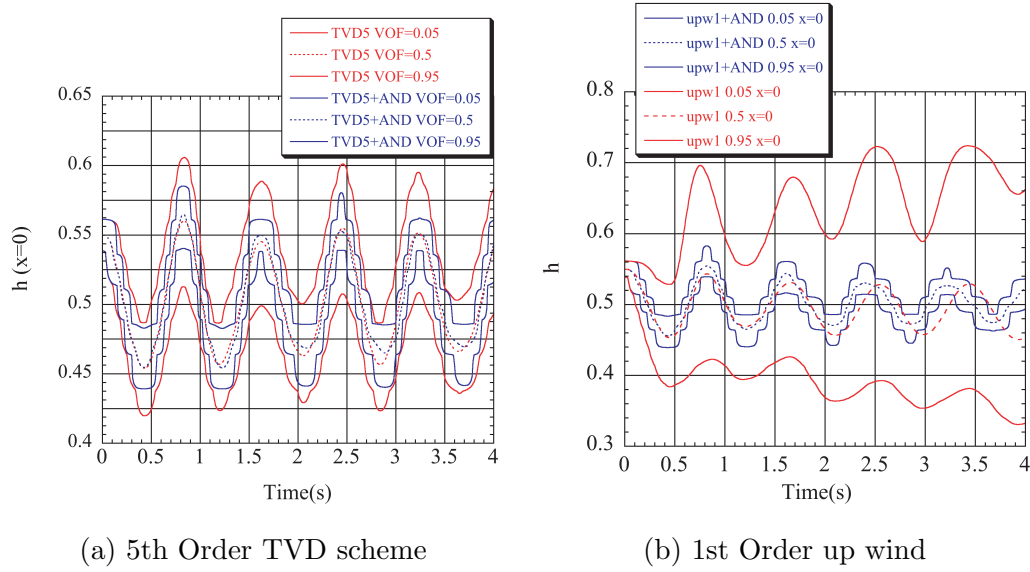


図 5.10: 水位の時系列 (非粘性流体)

### 粘性流体におけるスロッシング

次に、粘性流体を対象とした、外力によって周期的な変位を生じる 3 次元矩形水槽のスロッシングの数値計算を行い、実験値 [7] との比較を行った。水槽の緒元は幅 1.0m、奥行 0.2m、高さ 1.0m であり、静水位が 0.5m である。振幅  $A = 0.0093\text{m}$ 、角速度  $\omega = 5.311\text{rad/s}$  の条件で水槽を振動させ、水槽内に生じるスロッシング現象を数値解析対象とした。外力加速度  $f$  は式 (5.7) で与えられる。

$$f = A\omega^2 \sin \omega t \quad (5.7)$$

液相の密度を  $1.0 \times 10^3 \text{kg/m}^3$ 、動粘性係数を  $1.0 \times 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$  とし、気相の密度を  $1.0 \text{kg/m}^3$ 、動粘性係数を  $1.0 \times 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$  とした。格子分割は  $40 \times 8 \times 40$  とした。図 5.11 に実験値および  $x = 1.0$  における水位の時系列を示す。図 5.11(a) は識別関数の移流計算に 5 次 TVD スキームを使用した計算例であり、図 5.11(b) は識別関数の移流計算に 5 次 TVD スキームを使用した後、AND フィルタを適用した計算例である。AND フィルタを使用しないケースでは実験値との良好な一致を見せているが、AND フィルタを使用したケースでは 4.0s の時点までは実験値と良好な一致を見るが、4.0s 以降最高水位の値が過小評価されている傾向が確認された。

図 5.12 に界面厚さの計算領域平均  $w_{\text{ave}}$  の時系列を示す。図 5.12 によると AND フィルタを適用したケースでは、界面幅が相対的に薄く保たれていることが確認できる。

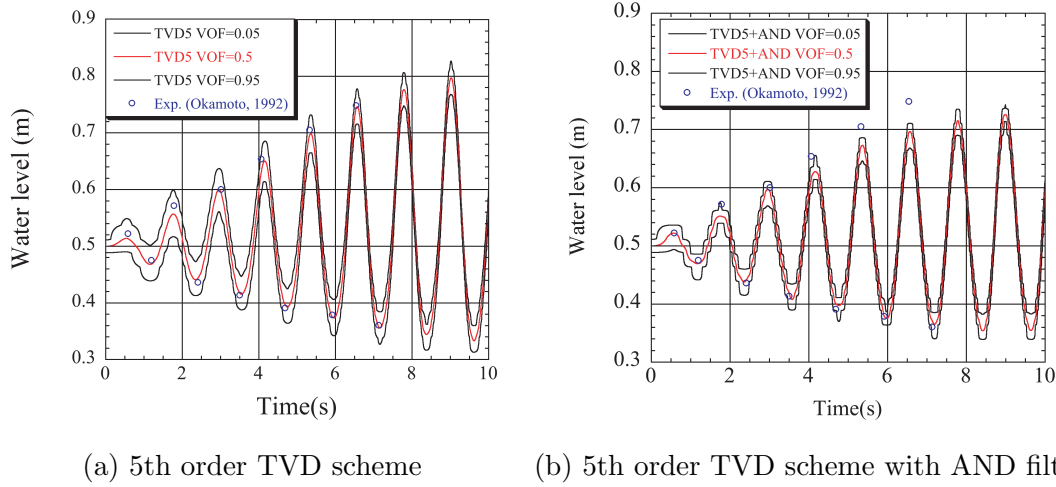


図 5.11: 水位の時系列 (粘性流体)

### 3次元矩形水槽スロッシング

次に、外力によって複雑な変位を生じる3次元矩形水槽のスロッシングの数値計算を行った。水槽の緒元は  $0.3 \times 0.3 \times 0.14\text{m}$  とし、計算領域を  $60 \times 60 \times 28$  のセルに分割した。流体計算においては計算領域を8分割し、並列計算を行った。並列計算における計算領域境界部のりしろ部分として4列分の格子を用いた。液相および気相の物性は粘性流体におけるスロッシングの数値計算例と同様とした。水槽に与える外力加速度は式 (5.8) の形によって与え、静止時の水位を  $0.1\text{m}$  とした。  $x$  方向、  $y$  方向の振幅  $A$  は  $1.5\text{m}$ ,  $0.09375\text{m}$ , 周波数  $\omega$  はそれぞれ  $0.66\pi\text{s}^{-1}$ ,  $1.32\pi\text{s}^{-1}$  とした。

$$f = A\omega^2 \sin \omega t \quad (5.8)$$

時間刻み  $\Delta t$  を  $0.01\text{s}$  とし、  $10\text{s}$  まで数値計算を行った。

図 5.13 に数値計算結果を示す。複雑な水平方向加速度によって大きく変形した界面を安定して追跡できていることが確認された。

## 5.2 表面張力が支配的な気液混相流数値計算例

### 5.2.1 2次元せん断流れ中の液滴分裂

#### 液滴分裂現象の再現

2次元における検証問題として、せん断流れ中の液滴分裂について数値計算を行った。本節の数値計算は文献 [8] を参考とした。計算領域は2枚の平行平板間とし、  $x$  方向に周

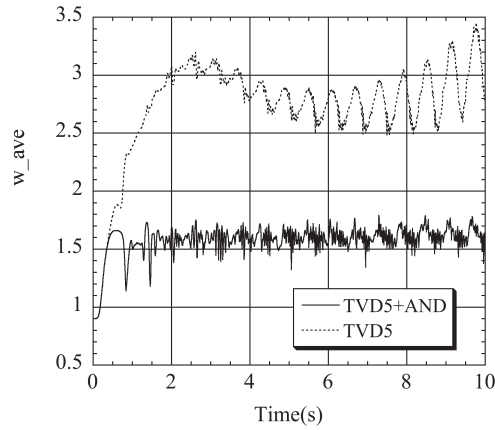


図 5.12: 界面平均厚さの時系列 (粘性流体)

期境界条件とした．2枚の平板は距離  $H$  だけ離れており，速度  $U_w$  で互いに逆方向に水平移動している．平板間に円形の液滴を配置し，せん断強さ  $\dot{\gamma} = 2U_w/H$  によって引き起こされる液滴の分裂を数値計算にて再現した．

本計算では  $H = 1$ ， $U_w = 1$ ，液滴の直径を 0.25 とし，計算領域  $1.0 \times 1.0$  に対して計算セル数は  $64 \times 64$  を用いた．液滴の変形・分裂を支配するパラメータはレイノルズ数  $Re$  とキャピラリー数  $Ca$  であり，次式で定義される．

$$Re \equiv \left(\frac{D}{2}\right)^2 \frac{\dot{\gamma}}{\nu} \quad (5.9)$$

$$Ca \equiv \frac{D\dot{\gamma}\nu}{2\sigma} \quad (5.10)$$

本検証計算においては，液滴と周囲の流体の密度および粘性は同一であり，重力加速度を 0， $Ca$  数を 0.1， $Re$  数を 1.0 とした．液滴の分裂過程を図 5.14 に示す．ただし， $t^* = t\dot{\gamma}$  である． $t^* = 12.0$  から  $t^* = 14.4$  にかけて液滴の分裂過程を定性的に再現していることが確認された．一方で， $t^* = 14.4$  において対称性が崩れている点に関しては今後詳細に検討する必要がある．対称性の崩れの原因として考えられる点は，対称性の崩れが液滴分裂時を境に顕著に現れていること，本手法では計算セル内に複数の境界面が通過することは想定していないことから，液相の領域が細長くなり計算セルに対して狭くなった場合に適切に表面張力を評価できなくなっている可能性が挙げられる．

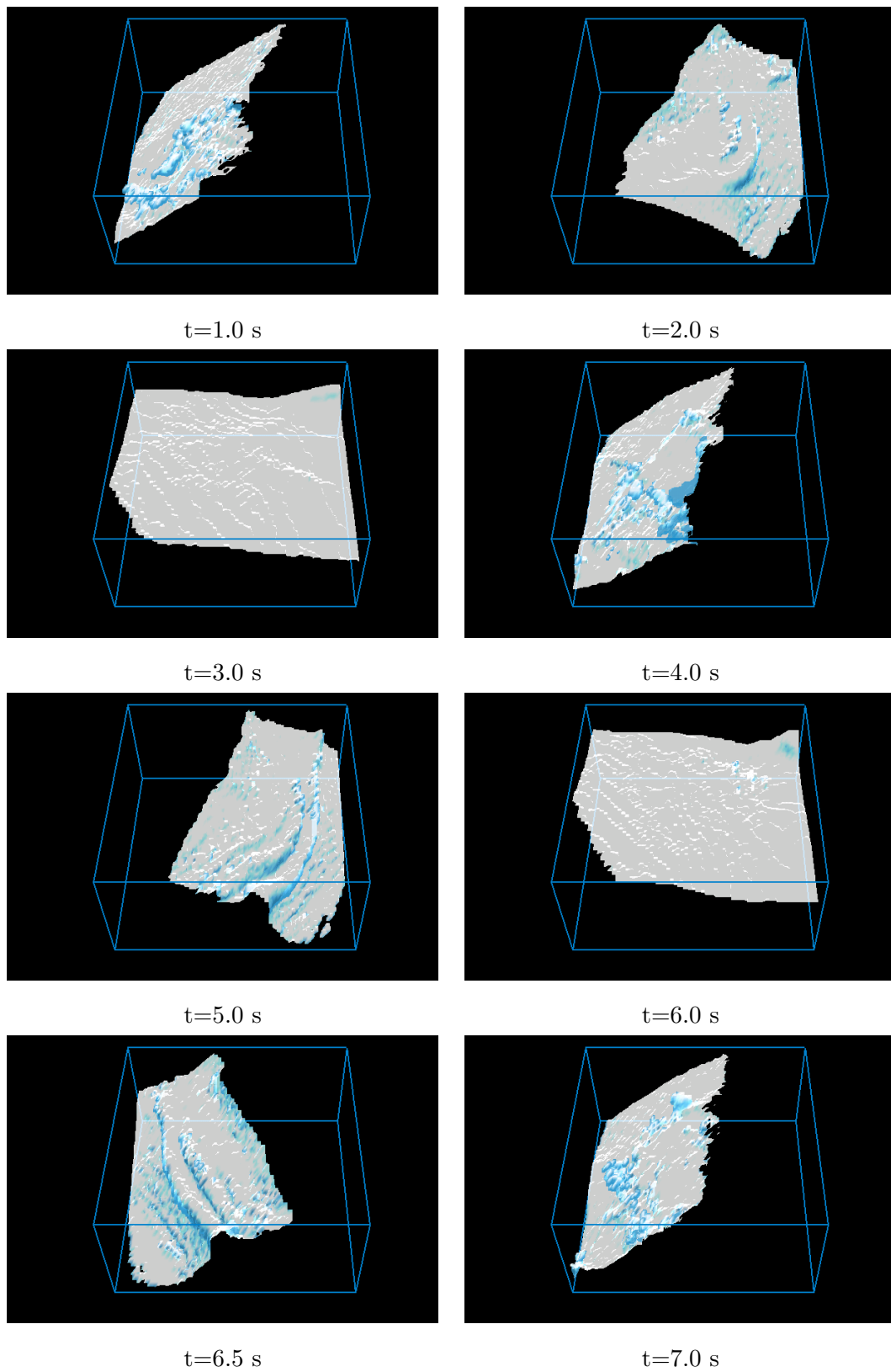


図 5.13: 3次元矩形水槽内スロッシング



### CSF モデルとの比較検証

次に、同様のせん断流れ中の液滴の変形を既存手法である CSF モデルを用いた数値計算と比較し、本手法による数値計算の妥当性を確かめた。CSF モデルを用いた数値計算においては、識別関数の滑らかさを保つために AND フィルタを使用していないが、その他の計算手法は同一である。計算領域は  $256 \times 64$  とし、 $256 \times 64$  のセル分割を用いた。また、計算領域中央に配置する液滴の直径は 32 とし、Re 数は 4.0、Ca 数は 0.8 とした。液滴と周囲の流体の質量および粘性は同一であり、重力加速度を 0 としている。

図 5.15 に無次元時間における液滴の形状変化の時系列を比較する。(a) に本手法を適用した場合の数値計算結果、(b) に CSF モデルによる結果を示す。図中には、体積占有率の 0.05, 0.5 および 0.95 の等高線を示している。時間の進展とともに変形する液滴の傾きは両手法ともほぼ同様である。液滴の形状は、 $t^* = 4.6875$  まではほぼ同様であるが、 $t^* = 7.8125$  以降においては (a) では逆 S 字形状となっているが (b) ではほぼ直線的であり、若干の差異が認められる。また、(b) においては液滴周辺に数値拡散が認められ、(a) と比較して液滴の輪郭が不明瞭である。以上の比較から、相対的に少ない計算セルを用いて表面張力を評価する本手法を用いても既存手法とほぼ同等の結果を得るとともに、液滴の輪郭を比較的明瞭に保つことが確かめられた。

### 様々な形態の液滴分裂現象の 2 次元計算

2 次元における検証問題として、せん断流れ中の液滴分裂について数値計算を行った。計算領域は 2 枚の平行平板間とし、水平方向に周期境界条件とした。2 枚の平板は距離  $H$  だけ離れており、速度  $U_w$  で互いに逆方向に水平移動している。平板間に円形の液滴を配置し、せん断強さ  $\dot{\gamma} = 2U_w/H$  によって引き起こされる液滴の分裂を数値計算にて再現した。本計算では  $H = 64$ ,  $U_w = 1$ , 液滴の直径を 16 とし、計算領域  $64 \times 256$  に対して計算セル数は  $64 \times 256$  を用いた。液滴の変形・分裂を支配するパラメータはレイノルズ数 Re とキャピラリー数 Ca であり、 $Re \equiv (D/2)^2 \dot{\gamma} / \nu_C$   $Ca \equiv D \dot{\gamma} \nu_C / 2\sigma$  で定義される。ただし、 $\nu_C$  は周囲流体の粘度である。本検証計算においては、液滴と周囲の流体の質量は同一であり、重力加速度を 0 とした。液滴と周囲の流体の粘度比を  $\eta = \nu_D / \nu_C$  とした。 $\eta = 1$ ,  $Re=20$ ,  $Ca=0.1$  とした時の液滴の分裂過程を図 5.16(a) に示す。ただし、 $t^* = t\dot{\gamma}$  である。Re 数が大きくなると、fracture と呼ばれる分裂形態が観察されることが知られているが、図 5.16(a) はこの液滴の分裂過程を定性的に再現していることが確認された。また、Re 数および Ca 数によっては、液滴は分裂せずに楕円形に変形する。図 5.17 に Re 数、Ca 数および分裂現象の有無の関係について既往研究結果とともに整理した。格子ボルツマン法による 2 次元計算の結果 [9] と同じ傾向の結果を得られていることが確認できた。

また、図 5.16(b) に粘度比が大きいケース ( $\eta = 10$ ,  $Re=1$ ,  $Ca=16$ ) の結果を示す。粘度比 1 の場合よりも分裂しやすく、多くの液滴に分裂している様子が捉えられた。

### 様々な形態の液滴変形・分裂現象の 3 次元計算

せん断流れ中の液滴変形および分裂について種々の検証計算を行った。せん断流れは計算領域の下部と上部において逆方向に等速運動する壁によって生じる。液滴の変形現象は、主に 4 つの無次元数によって支配される。表面張力と粘性の比であるキャピラリー数  $Ca$ 、レイノルズ数  $Re$ 、液滴と支配流体の密度比および液滴と支配流体の粘性比  $\lambda$  となる。理論的研究および実験的研究より、 $Ca$  がある値より小さな値である時は液滴の変形はある平衡状態に達することが知られている。 $Ca$  はその値よりも大きい場合には液滴の変形は継続し、最終的に分裂する。 $\lambda = 1$  の場合には、キャピラリー数の臨界値は約 0.41 である。

$$Re \equiv (a/2)^2 \dot{\gamma} / \nu_c \quad (5.11)$$

$$Ca \equiv a \dot{\gamma} \nu_c / 2\sigma \quad (5.12)$$

$$\lambda = \mu_d / \mu_c \quad (5.13)$$

ただし、 $\nu_c$  は支配流体の動粘性係数である。液滴の変形が平衡状態に達する場合においては、2 つのパラメーターを用いて変形状態を評価した。一つ目のパラメーターは、図 5.19 に示されるテイラー変形パラメーターと呼ばれるパラメーターで、最終変形状態の液滴の長径  $L$  と短径  $B$  から求められる。

$$D = \frac{L - B}{L + B} \quad (5.14)$$

本節においては、 $Ca$  が臨界値よりも小さな値である時に液滴の最終変形状態が既往研究にて得られたものと一致するか調べることにする。

以下の数値実験では、計算領域は  $256 \times 64 \times 64$  とした。速度  $U_w$  にて逆方向に等速運動する上下の境界の間隔は  $H$  とし、支配流体のせん断力は  $\dot{\gamma} = 2U_w/H$  にて求められる。ここでは、 $H = 64$ ,  $U_w = 1$  とし、初期の液滴の直径を  $a = 16$  とした。計算領域は、 $256 \times 64 \times 64$  の立方体計算セルに分割され、支配流体と液滴の密度は同じである。水平方向の境界条件は、周期境界条件とし、完全に発達したせん断流れを初期の流速場として与えた。

数値実験は、キャピラリー数  $Ca = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$  およびレイノルズ数  $Re = 0.2, 1.0, 10$  の条件で行った。図 5.19 および図 5.20 には、 $Ca$  数および  $Re$  数を変化させて得られたテイラー変形パラメーターと液滴の傾き角度  $\theta$  を示す。ただし、VOF 法 [8]

によって得られた結果は  $Re = 0.0625$  の条件で得られたものである。数値実験によって得られたテイラー変形パラメーター  $D$  は、理論解および実験から得られた結果と比較してよく一致している。液滴の傾き角  $\theta$  についても、既往研究とほぼ同様の結果を得た。図 5.21 には、 $Ca$  数 0.1, 0.2 および 0.3 における液滴の最終変形状態の比較を示す。図の右側が数値実験によって得られた結果であり、左側が既往研究 [8] によって得られた結果である。これらの結果は、良く一致していることが確認できる。

次に、 $Ca$  数が臨界値より大きく、液滴が分裂するパターンについて検証を行った。数値実験の結果は、 $Ca-Re$  平面にて整理した。 $Re$  数が 0.2 および 1.0 の場合は、 $Ca$  数が 0.4 を超えると液滴が分裂した。 $Re$  数が 10 の場合には  $Ca$  数が 0.2 を超えると液滴が分裂する結果となった。これらは、図 5.22 に示される通り、既往研究と同様の傾向を示す結果である。図 5.22 では、実線が既往研究によって得られた液滴分裂臨界値の値を示す。実線より下の部位は液滴分裂が起こらない領域で、実線より上側が液滴分裂が起こるとされる領域である。図中で  $\times$  は数値実験によって液滴分裂が起こったことを示し、丸は液滴の変形が平衡状態に達したことを示す。 $Re$  数が 1.0 かつ  $Ca$  数が 0.3 であるケースのみ実線にて示された領域と一致しなかったが、全体的には既往研究にて得られた結果の傾向をよく再現している。 $Re$  数 0.2 および  $Ca$  数 0.5 の場合において図 5.23 に数値実験により得られた液滴分裂形状の時系列を示す。

### 5.2.2 落下液滴の液面衝突

#### 2次元数値計算例

次に、落下液滴の液面衝突現象について数値計算を行った。計算領域は  $x$  方向、 $y$  方向にそれぞれ 15m, 5m とし、 $\Delta x = \Delta y = 0.1m$  とした。液滴の密度および動粘性係数は  $1000kg/m^3$  および  $1.0 \times 10^{-6}m^2/s$ 、気相の密度および動粘性係数は  $1.0kg/m^3$  および  $1.0 \times 10^{-5}m^2/s$  とした。液滴の初期位置は  $(x, y) = (7.5, 2.0)$  とし、液滴の直径は 3m とした。水槽内の初期水位は 0.3m とした。重量力速度  $9.8m/s^2$ 、表面張力を  $72 \times 10^{-3}N/m$  として  $t = 0.0s$  から  $t = 1.6s$  まで数値計算を行った。図 5.24 に気液界面の時間変化を示す。気液界面は、識別関数の等高線にて示してあり、0.95, 0.5 および 0.05 の値で等高線を示している。本手法では時間経過とともに変化する界面形状を明瞭に捉えるとともに、文献 [13] に示されている CSF モデルを用いた数値計算例と同様、落下する液滴の下面が水面に到達した時点から液滴の淵にジェット状に飛び出す形状が認められ、クラウンと呼ばれる液相による鉛直方向の壁を形成した後、クラウンの半径を広げながら外側に倒れる様子が再現されている。これらの一連の液相の挙動は定性的に妥当なものと考えられる。

### 3次元数値計算例

3次元計算における適用性検証として、落下液滴による液面衝突現象について数値計算を行った。計算領域は  $x$  方向、 $y$  方向、 $z$  方向にそれぞれ 10m, 10m, 5m とし、 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.05\text{m}$  とした。液滴および気相の物性は 2次元液滴落下問題の場合と同様である。液滴の初期位置は  $(x, y, z) = (5.0, 5.0, 2.2)$  とし、液滴の直径は 3.2m とした。水槽内の初期水位は、0.3m とした。重量力速度  $9.8\text{m/s}^2$ 、表面張力を  $72 \times 10^{-3}\text{N/m}$  として  $t = 0.0\text{s}$  から  $t = 1.6\text{s}$  まで数値計算を行った。図 5.25 に気液界面の時間変化を示す。気液界面は、識別関数の値が 0.05 である等値面にて示してある。VOF 法を用いた場合、界面位置を識別関数が 0.5 となる等値面で表現する場合が多いが、関数の性質上、本来は 0 からの立ち上がり部を界面位置として処理すべきであるため、このような表現を用いた。文献 [13, 14] に示される VOF 法の数値計算結果と同様、液滴の衝突時点からミルククラウンと呼ばれる円筒状の壁が形成され、時間とともにその半径が広がるとともに、円筒の頂上部分では壁を形成している液相がちぎれて細かい液滴等の複雑な形状となる様子が再現されている。

このため本手法で得られた界面形状は定性的に妥当なものと考えられる。

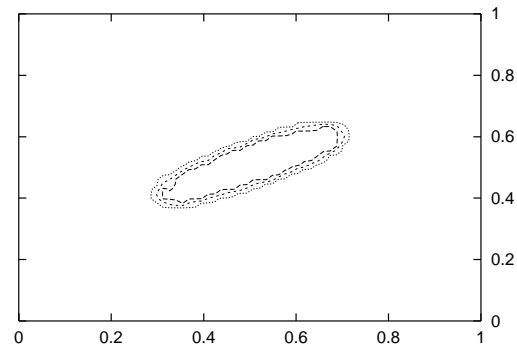
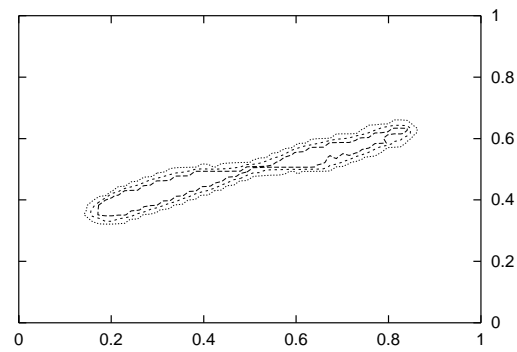
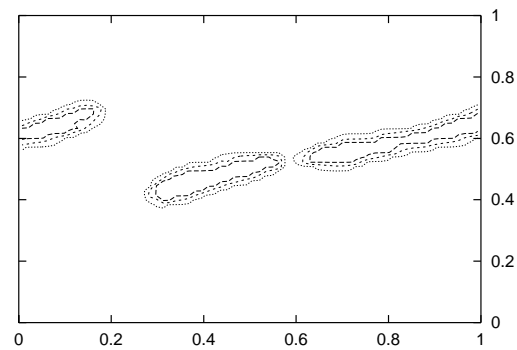
(a)  $t^*=4.0$ (b)  $t^*=12.0$ (c)  $t^*=14.4$ 

図 5.14: 2次元せん断流れ中の液滴分裂

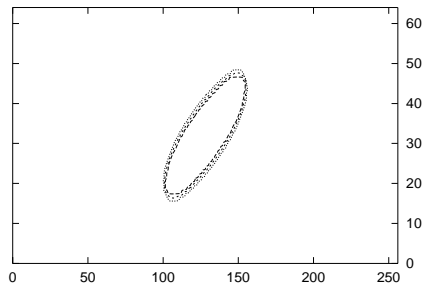
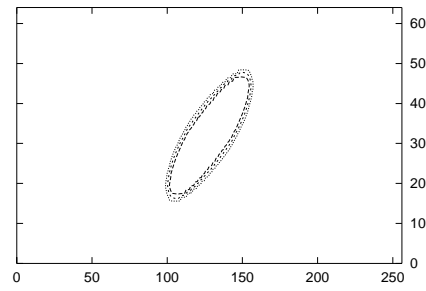
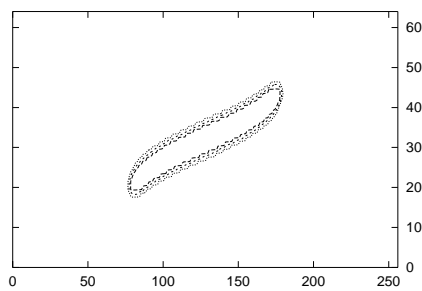
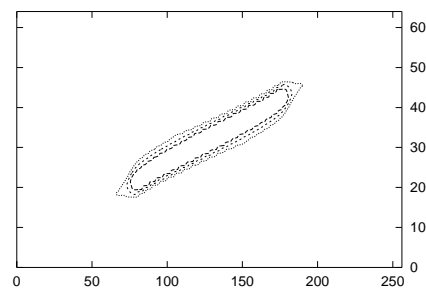
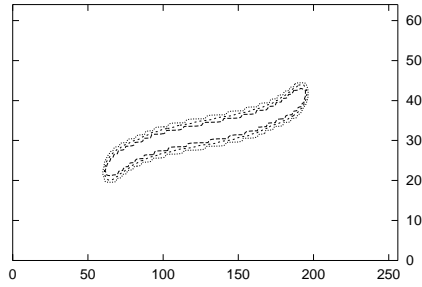
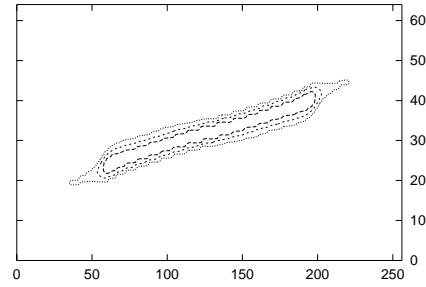
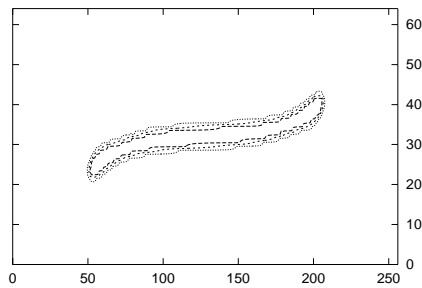
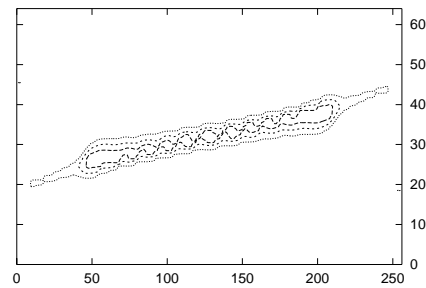
(a)  $t^*=1.56$  (提案手法)(b)  $t^*=1.56$  (CSF モデル)(a)  $t^*=4.6875$  (提案手法)(b)  $t^*=4.6875$  (CSF モデル)(a)  $t^*=7.8125$  (提案手法)(b)  $t^*=7.8125$  (CSF モデル)(a)  $t^*=10.9375$  (提案手法)(b)  $t^*=10.9375$  (CSF モデル)

図 5.15: 2次元せん断流れ中の液滴変形

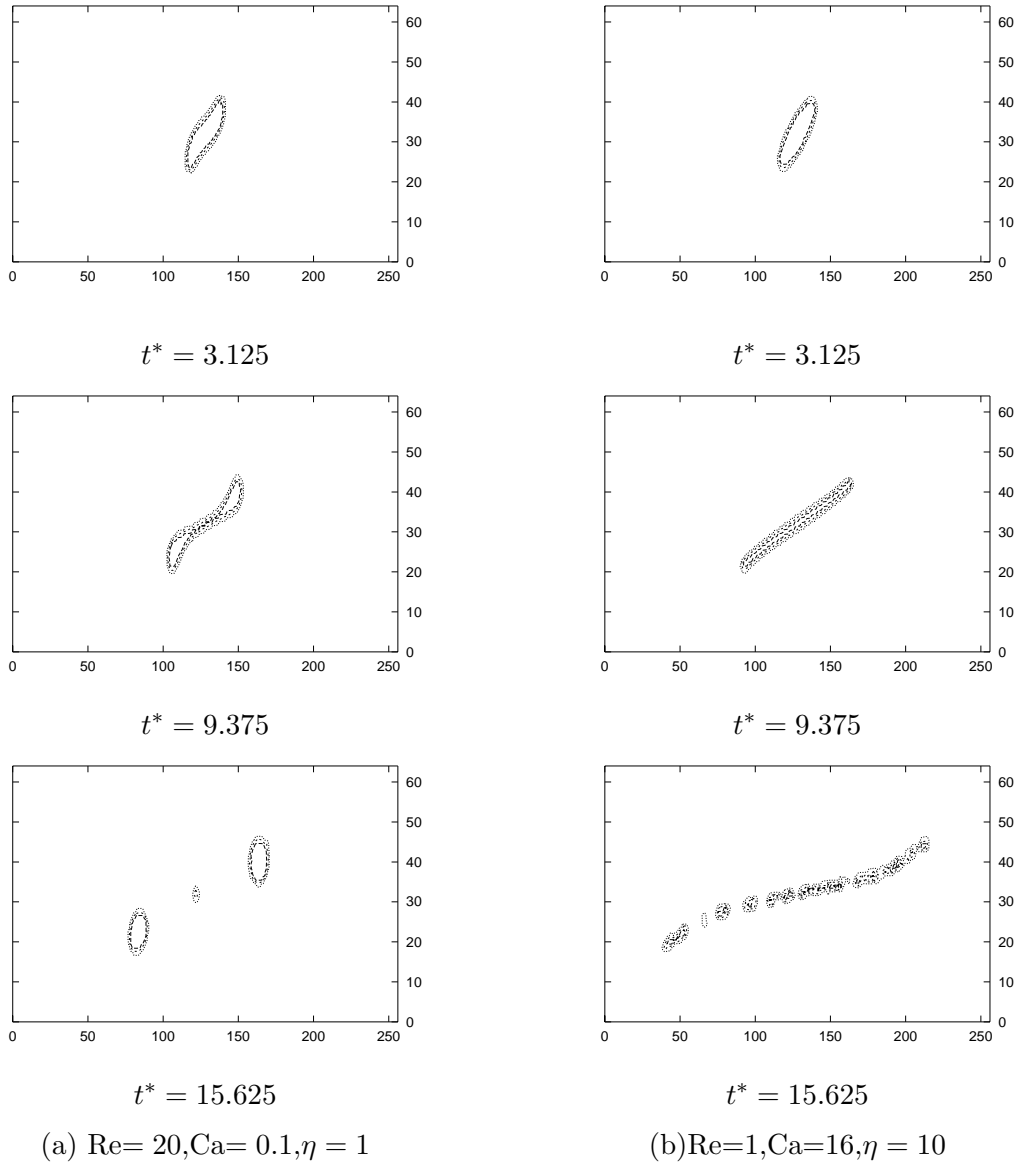


図 5.16: 液滴分裂の時系列図. (識別関数の等高線は 0.05, 0.5, 0.95 の値で示す)

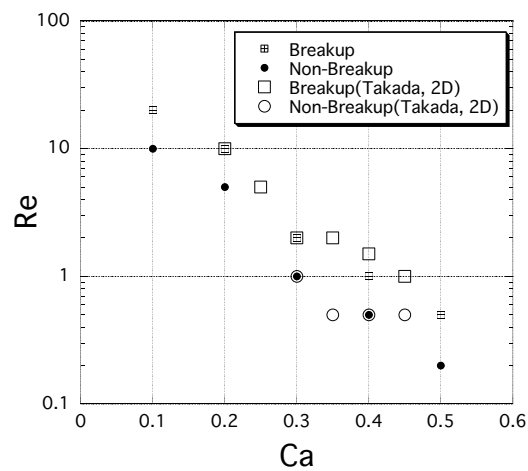
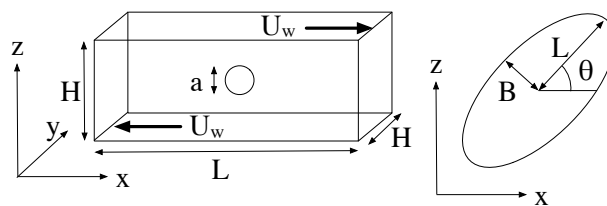
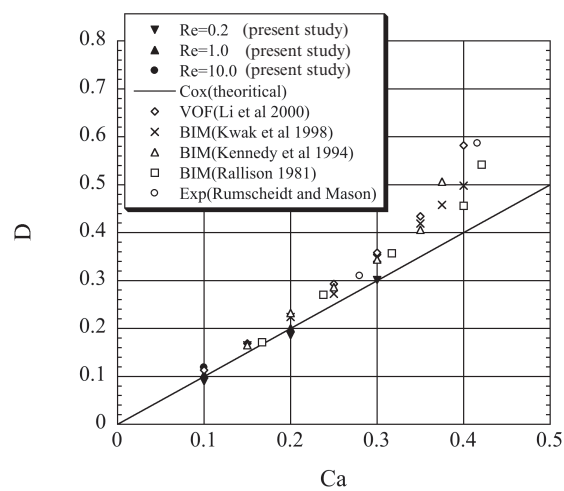
図 5.17:  $Ca$  および  $Re$  と液滴分裂の関係

図 5.18: せん断流れ中の液滴変形計算における計算領域

図 5.19: 変形度と  $Ca$  数の関係



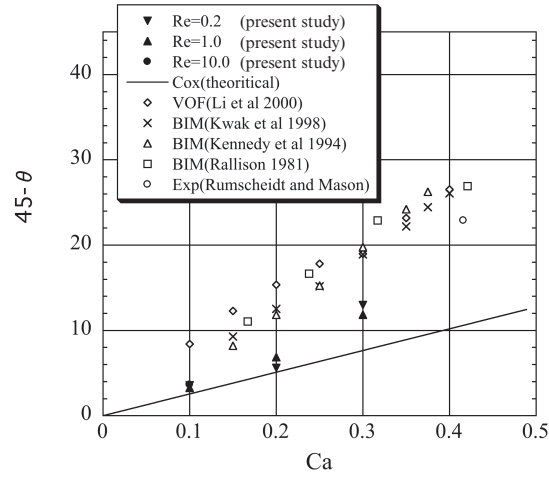


図 5.20: 既往研究 [10], [11], [12] との液滴変形度の比較

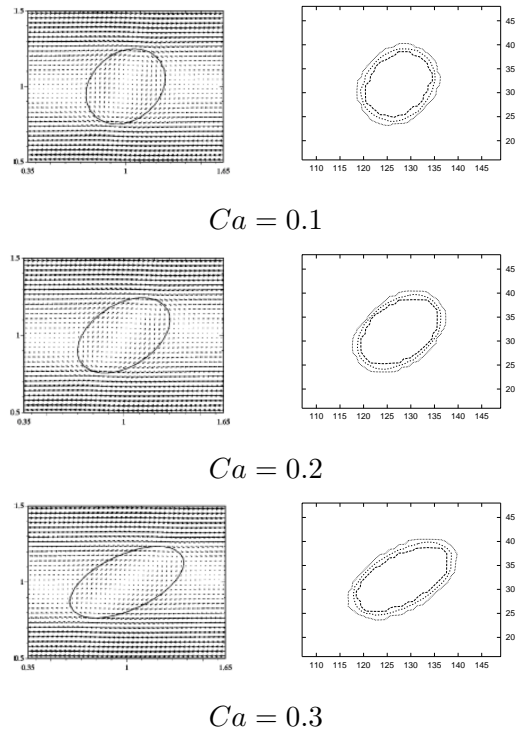


図 5.21: 既往研究 [8] による液滴変形最終状態 (左) と本研究による液滴変形最終状態 (右) の比較  $Ca = 0.1, 0.2, 0.3$

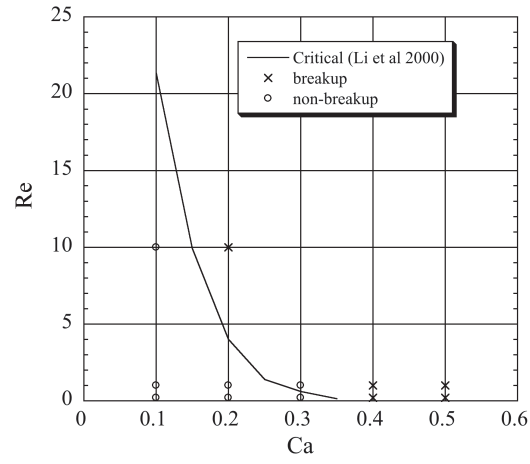


図 5.22: 同質量同粘性条件下での液滴分裂の有無と Re 数, Ca 数の関係

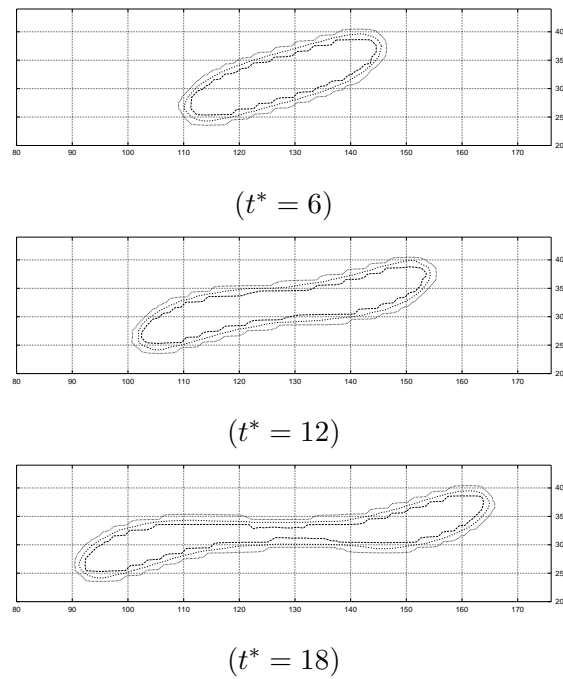


図 5.23: Ca 数 0.5, Re 数 0.2, 同密度同粘性条件下での液滴分裂に至るまでの変形図.  $(t^* = t\dot{\gamma})$

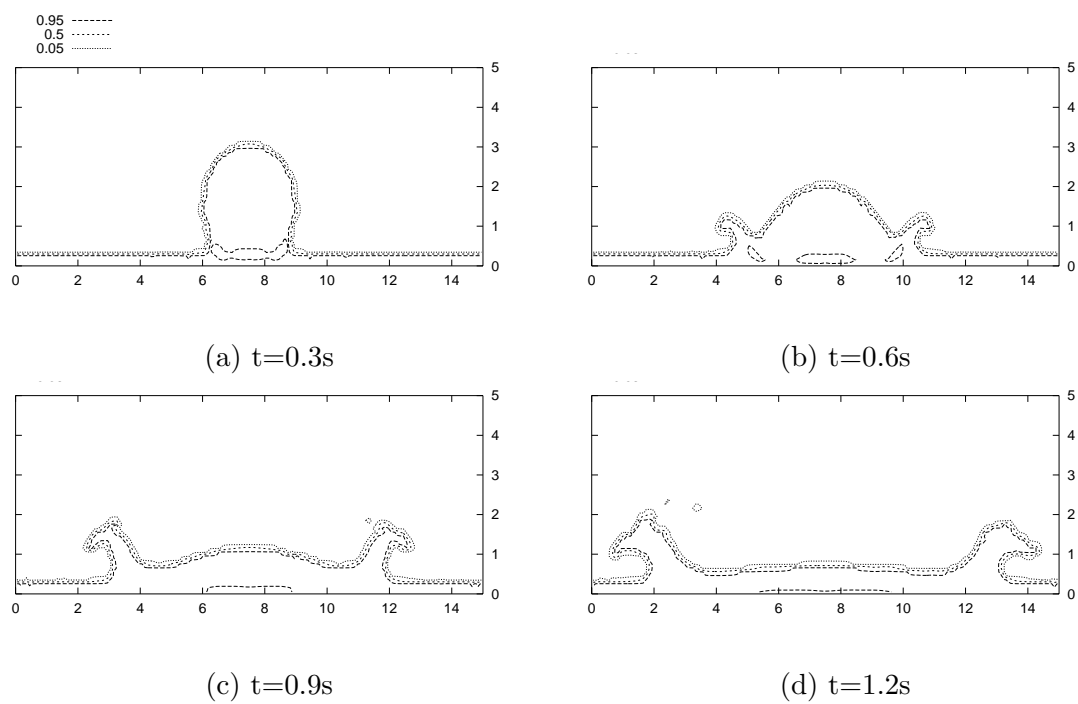


図 5.24: 2次元平面内液滴落下問題 (識別関数コンター図)

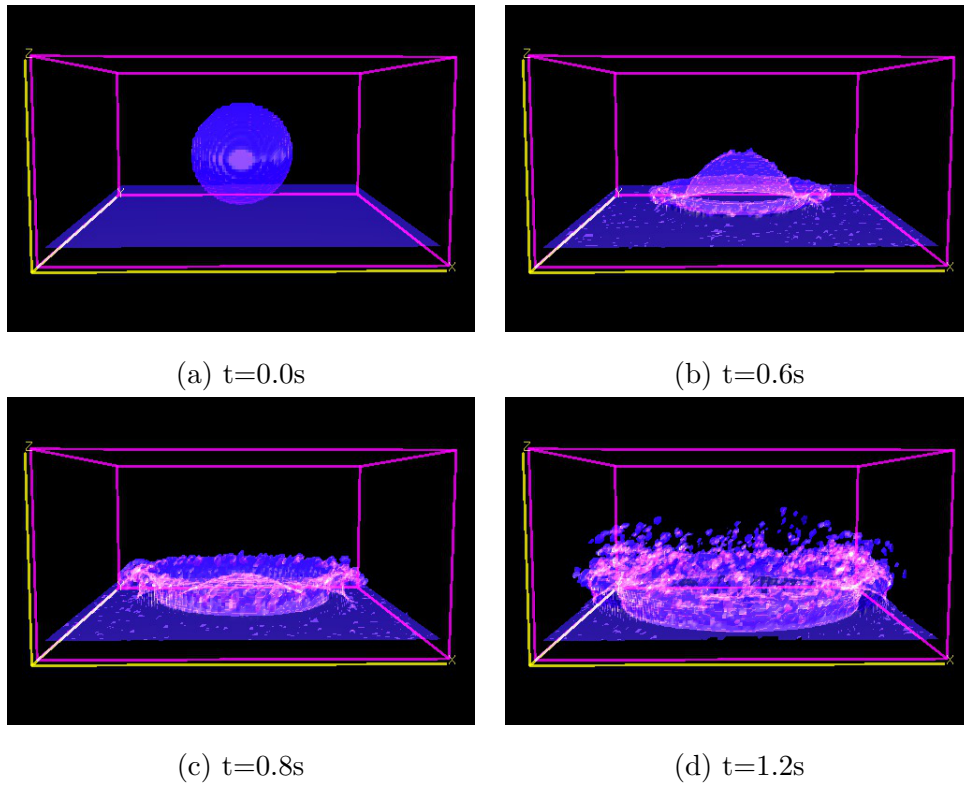


図 5.25: 3次元液滴落下問題 (識別関数等値面)

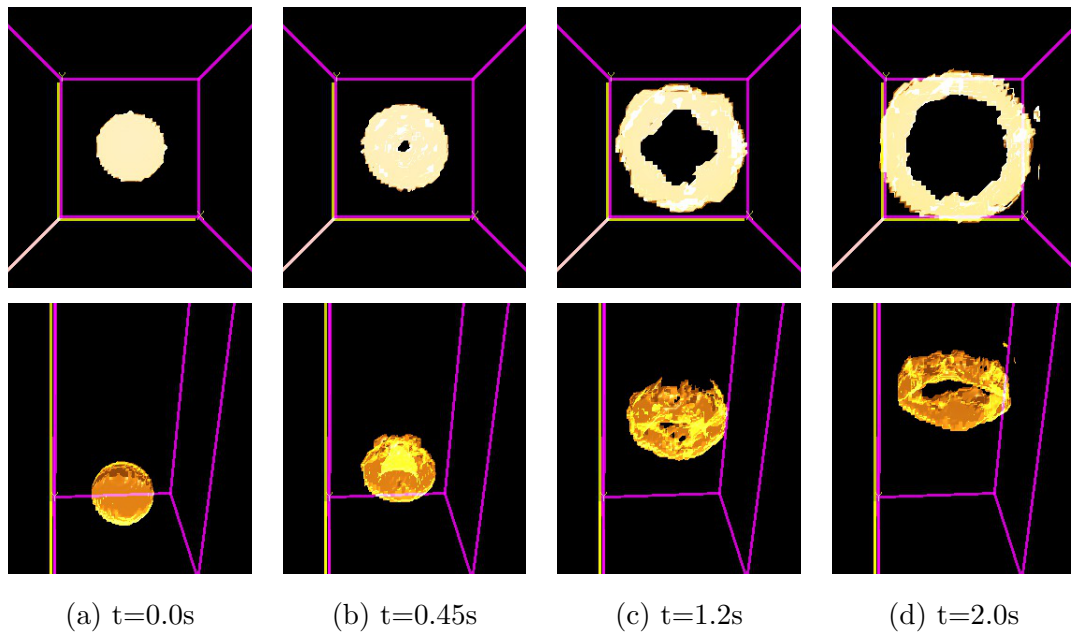


図 5.26: バブルリングの生成 (識別関数等値面)

### 5.2.3 落下液滴の変形

次に，落下液滴の変形に関する実験 [15] の再現計算を行い，手法の適用性を確かめた．識別関数の移流計算においては AND フィルタを使用したケースと 3 次元 PLIC を用いたケースを検討した．

落下する液滴の変形現象は，支配流体および液滴流体の粘性比，密度比，表面張力などによりいくつかの無次元パラメータによって支配されている．Eotvos 数，Morton 数は次式によって定義される．

$$Eo = \frac{g\Delta\rho a^2}{\sigma} \quad (5.15)$$

$$Mo = \frac{g\Delta\rho\rho_C^2\nu_C^4}{\sigma^3} \quad (5.16)$$

ここに， $a$  は液滴直径， $\nu_C, \nu_D$  はそれぞれ周囲流体，液滴流体の動粘性係数， $\sigma$  は表面張力係数である． $\rho_C, \rho_D$  はそれぞれ周囲流体，液滴流体の密度， $\Delta\rho = \rho_D - \rho_C$  である．既往文献 [15] においては，表 5.2 に示される流体の組み合わせにおいて液滴落下の実験を行っており，リング形状への変形の有無および終端沈降速度が報告されている．本数値計算においては，可能な限り同様の条件にて数値計算を行い，リング形状への変形の有無と終端沈降速度から得られる抵抗係数について実験結果と比較した．

落下液滴がリング状態に変形しない場合においては，終端沈降速度と式 (5.17) によって抵抗係数を求め，球体および円盤の抵抗係数の実験式 (式 5.18, 5.19) との比較を行った．ただし，Froude 数は  $Fr = u_t / \sqrt{ga}$  にて定義した．

$$C_d = \frac{\pi}{3} \frac{\Delta\rho}{\rho_C} \frac{a^2}{A} \frac{1}{Fr} \quad (5.17)$$

ただし， $A$  は液滴の沈下方向の代表面積， $u_t$  は終端沈降速度である．

$$C_d^{\text{sphere}} = \frac{24}{Re} (1 + 0.1935 Re^{0.6305}) \quad 20 < Re < 260 \quad (5.18)$$

$$C_d^{\text{disk}} = \frac{64}{\pi Re} (1 + 0.138 Re^{0.792}) \quad 1.5 < Re < 133 \quad (5.19)$$

ただし， $Re$  数は  $Re = u_t a / \nu_C$  にて定義した．

落下液滴の液滴変形問題に対する計算領域は，図 5.27 に示され， $L = 9.57, H = 19.14\text{cm}$  とした．計算領域中に直径  $a = 1.34\text{cm}$  の球形の液滴を配置した．液滴の中心は， $(4.785, 4.785, 17.23)\text{cm}$  である．計算領域の境界はすべて non-slip 条件の壁面である．

重力加速度は  $g = 9.8\text{m/s}^2$  とした．計算領域は  $100 \times 100 \times 200$  の立方体セルに分割した．

表 5.3 に落下液滴の変形状態について結果をまとめた．表 5.3 の右から 2 列については， $r$  がリング状に変形したことを示し， $b$  がリング状へ変形しなかったことを示す．実験の列は既往文献 [15] のものであり，計算の列は本研究で得られた結果である．

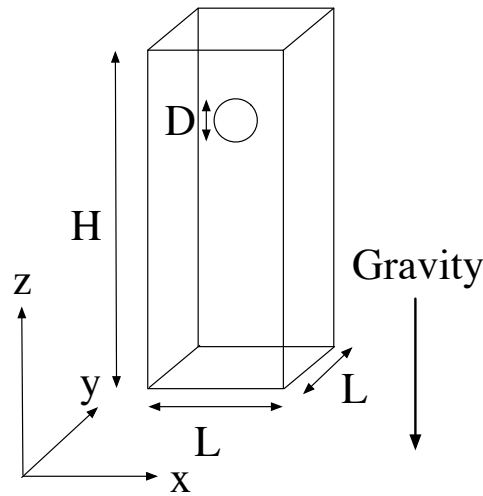


図 5.27: 液滴落下問題に対する計算領域

A1 から A8 までのケースのうち、A1 と A8 においてはリングの生成の有無について既往の結果と異なる結果となったが、A2 から A7 のケースについては、実験結果と同様の結果を得ることが出来た。また AND フィルタを用いた計算と 3 次元 PLIC を用いた計算では、全てのケースにおいて液滴の変形状態として同じ形態のものが得られた。

また、落下液滴がリング状に変形しないケースにおいては落下方向の代表面積と終端沈降速度から抵抗係数を求め、実験によって得られている球および円盤の抵抗係数と比較した。表 5.4 によると数値計算によって求められた抵抗係数は、実験式によって得られる円盤の抵抗係数と比較しても 5% 程度の誤差にとどまっている。なお、表 5.4 に示されているケースは AND フィルタを用いたケースである。A5, A6 のケースでは、Re 数が実験式の対象範囲外であるので参考値としている。図 5.28 には A3 のケースにおいて確認されたリング形状を示す。

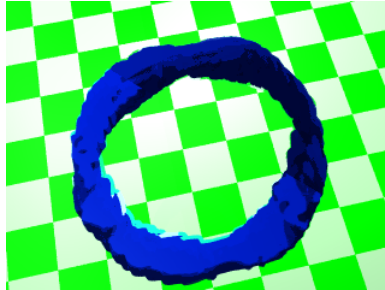


図 5.28: トーラス状となった液滴 (Case A3,  $t^* = 35$ )

表 5.2: 流体の物性値 [15]

	動粘性係数 [ $\times 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$ ]	密度 [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
Glycerin	656	1265
Canola oil	67	915
Saf. oil	51	920
Sesame oil	64	920
Soybean	53	922
Sil300	300	970
Sil400	400	970
Sil500	500	971
Water	1	1000

表 5.3: 液滴の変形形態の比較 [15]

	支配流体	液滴流体	Eu	Mo	実験	計算 (AND)	計算 (3DPLIC)
A1	Canola oil	Glycerin	17.2	$1.23 \times 10^{-3}$	r	b	b
A2	Saf. oil	Glycerin	38.8	$5.05 \times 10^{-3}$	r	r	r
A3	Sesame oil	Glycerin	39.9	$1.37 \times 10^{-2}$	r	r	r
A4	Soybean	Glycerin	32.7	$3.59 \times 10^{-3}$	r	r	r
A5	Soybean	Sil300	31.2	0.159	b	b	b
A6	Soybean	Sil400	31.6	0.166	b	b	b
A7	Soybean	Sil500	51.3	0.679	r	r	r
A8	Soybean	Water	40.5	0.132	b	r	r

表 5.4: 抵抗係数の比較 (\* は参考値)

	Re	$C_D^{\text{simulation}}$	$C_D^{\text{sphere}}$	$C_D^{\text{disk}}$	Error (%)
A1	24.0	2.43	2.44	2.30	5.65
A5	9.10	3.87	4.69*	4.01	3.49
A6	8.70	4.35	4.84*	4.14	5.07



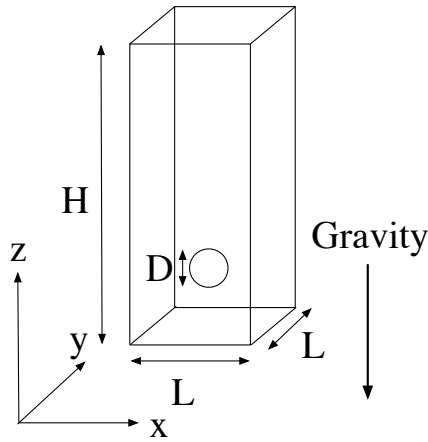


図 5.29: 上昇気泡問題における計算領域

### 5.2.4 上昇気泡の変形

#### 上昇気泡の変形

次に，上昇気泡の数値シミュレーションを行った．既往実験 [16] により条件によって上昇気泡の形が異なることが報告されている．数値実験の結果得られた上昇気泡の形や上昇速度は，既往の実験結果および既存の数値実験結果 [17] と比較した．上昇気泡の現象を支配する無次元数は以下に示す通り，エトベス数，モートン数，レイノルズ数，気泡と支配流体の密度比および粘度比である．本数値実験では， $E_o$ ， $Mo$ ， $Re$  は以下の通り定義される．

$$E_o = \frac{\rho_l g D^2}{\sigma} \quad (5.20)$$

$$Mo = \frac{g \mu_l^4}{\rho_l \sigma^3} \quad (5.21)$$

$$Re = \frac{\rho_l U_\infty}{\mu_l} \quad (5.22)$$

図 5.29 に示される通り，計算領域は  $2 \times 2 \times 5 \text{ cm}^3$  とした．初期状態において直径  $0.5 \text{ cm}$  気泡は計算領域の底部から  $1 \text{ cm}$  上部に配置される．全ての壁は no-slip 条件とした．計算領域の分割数は円筒座標系を用いた既往数値計算の  $100 \times 300$  を参考として決定した．本数値実験においては，A1 のケースでは  $80 \times 80 \times 200$  の格子分割を用い，その他のケースにおいては， $96 \times 96 \times 240$  を用いた．既往研究によれば，これらの格子分割数では格子分割が十分細かくないことに起因する微小な誤差を生じる可能性があることに注意する．計算領域の全ての境界が non-slip 境界であるため，気泡の上昇速度に壁の影響が入り込むこ

表 5.5: 上昇気泡問題における計算条件

Case	$\nu_l$	$\sigma$	Eo	Mo
A1	$1.131 \times 10^{-3}$	$2.826 \times 10^{-2}$	8.67	711
A3	$1.386 \times 10^{-5}$	$7.609 \times 10^{-3}$	32.2	$8.20 \times 10^{-4}$
A5	$8.223 \times 10^{-6}$	$2.13 \times 10^{-3}$	115	$4.63 \times 10^{-3}$
A7	$3.59 \times 10^{-5}$	$7.227 \times 10^{-4}$	339	43.1

とが確認されている。ただし、上昇気泡は壁の影響が顕著となる前に終端速度に達していることを確認している。既往実験の実験ケースの中から 4 ケースを選び、密度比および粘度比を  $\rho_l/\rho_b = 1000$ ,  $\mu_l/\mu_b = 100$  とした上で、幅広い範囲のエトベス数、レイノルズ数における上昇気泡の変形を計算した。表 5.5 には既往実験 [16] から選んだ実験ケースにおける流体の物性値と無次元数を示す。

計算結果から得られた終端上昇速度と気泡の形状は、既往実験結果 [16] および既存数値計算結果 [17] と比較した。表 5.6 は気泡の上昇速度の終端速度の比較であるが、A7 と A5 のケースにおいては、既存の結果と良く一致した結果が得られている。上昇気泡の形状については、A1 のケースにおいては既往研究による結果と良く一致する形状が得られた。A3 のケースにおいては、平たい形状の気泡形状は再現できたが、気泡の周囲のふちの部分の尖った部分は十分に再現できなかった。A5 のケースにおいては、既往研究と同様に気泡形状は平たい形状が得られているが、気泡の周囲のふちの部分は既往研究の通りに再現できなかった。A7 のケースにおいては、既往研究に見られる気泡下部のスカートの部分が再現できなかった。これらのケースのうち、一番エトベス数が小さいケース (A1) およびモートン数が小さいケース (A3) においては表面張力が粘性に対して支配的になる。これらのケースで精度が落ちることから考えられることは、提案手法では簡便な界面形状推定に起因する計算精度の限界から、表面張力の評価精度が落ちていることによるものと考えられる。相対的に高いエトベス数やモートン数のケースでは、終端上昇速度は、既往研究によるものとよく一致している。しかしながら、気泡変形は細部においてその形状を再現することはできなかった。

### バブルリングの生成

3 次元計算における適用性検証として、水槽内を上昇する気泡の数値計算を行った。計算領域は  $x$  方向、 $y$  方向、 $z$  方向にそれぞれ 4m, 4m, 12m とし、 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.05\text{m}$  とした。液滴の密度および動粘性係数は  $1000\text{kg/m}^3$  および  $1.0 \times 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$ 、気相の密度お

表 5.6: 気泡の終端速度の比較

Case	Re(Experiment)	Re (Current study)	Error(%)
A1	0.078	0.033	57.5
A3	55.3	119	115
A5	94.0	88.2	6.21
A7	18.3	21.2	15.7

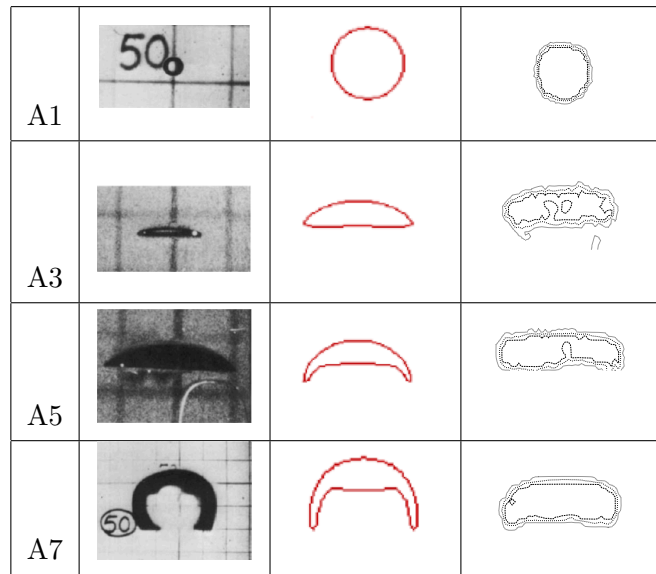


図 5.30: 実験 [16] から得られた上昇気泡の終端変形状態 (左) と LBM [17] によって得られた変形状態 (中) と本研究で得られた変形状態 (右) の比較

よび動粘性係数は  $1.0\text{kg/m}^3$  および  $1.0 \times 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$  とした。気泡の初期位置は  $(x, y, z) = (2.0, 2.0, 1.5)$  とし、直径は  $2.0\text{m}$  の球形とした。水槽内の気相はこの気泡のみで、自由水面は含まれない。重量力速度  $9.8\text{m}^3/\text{s}$ 、表面張力を  $72 \times 10^{-3}\text{N/m}$  として  $t = 0.0\text{s}$  から  $t = 2.0\text{s}$  まで数値計算を行った。図 5.26 に上昇気泡の時間変化を示す。気液界面表示は前節の液滴落下問題と同様、識別関数 0.05 の値で等値面を示している。

本手法では文献 [18] による数値計算結果と同様、時間経過とともに上昇する気泡の中央部下方の凹部が大きくなり、最終的に中央部の液相がつながり、リング状の気泡となる様子を呈している。一旦、リング状になった気泡はさらにその直径を広げている。

### 5.2.5 連結水槽間の流体交換

最後に、本論文で提案された数値計算手法の応用例として水と空気が激しく混ざり合い気液界面が複雑に変形する現象を取り上げる。具体的には図 5.31 に示す連結水槽間を水と空気が重力によって交換する現象を数値計算対象とした。連結水槽は、 $5 \times 5 \times 5\text{m}^3$  の立方体形状で、 $z = 2\text{m}$  と  $z = 3\text{m}$  の間には上下の水槽を仕切る板が入っている。板の中央部には  $1 \times 1\text{m}^2$  のサイズの穴があいており、上下の水槽を連結するダクトとなっている。初期状態において、下部水槽には空気が満たされ、上部水槽に水が貯められており、水位は  $z = 4\text{m}$  である。また、穴は  $z = 3\text{m}$  の高さで塞がれているものとする。

計算開始とともに穴が開放され、上部水槽に貯められた水が自由落下して下部水槽に流れ出すと同時に、下部水槽の空気が上部水槽に押し出される。

数値計算においては、水槽全体を  $80 \times 80 \times 80$  にセル分割した。水と空気の物性および重力加速度は、3次元液滴落下問題の条件と同様である。

図 5.32 に得られた界面形状のスナップショットのいくつかを示す。 $t = 0.6\text{s}$  においては、ダクトの角から気泡が上昇し流体交換が始まっている。 $t = 1.2\text{s}$  においては、ダクトを通じて水が下部水槽へ落下しているとともに、上部水槽では気泡が水面に達することで水面が乱れている。 $t = 2.4\text{s}$  においては下部水槽の水位が徐々に上昇している。ダクト付近には空気の道が形成され、空気の抜け道を示していると考えられる。

これらの一連の流れにおいて、本手法では定性的に妥当な結果を得たと考えられる。

また、同一の数値計算を第 3 章において検討した 3次元 PLIC を用いて行ったが、 $t = 0.5\text{s}$  程度までしか計算が進まなかった。

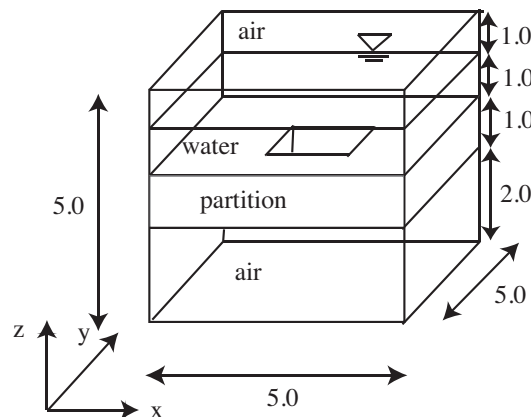


図 5.31: 連結水槽緒元 (単位 m)

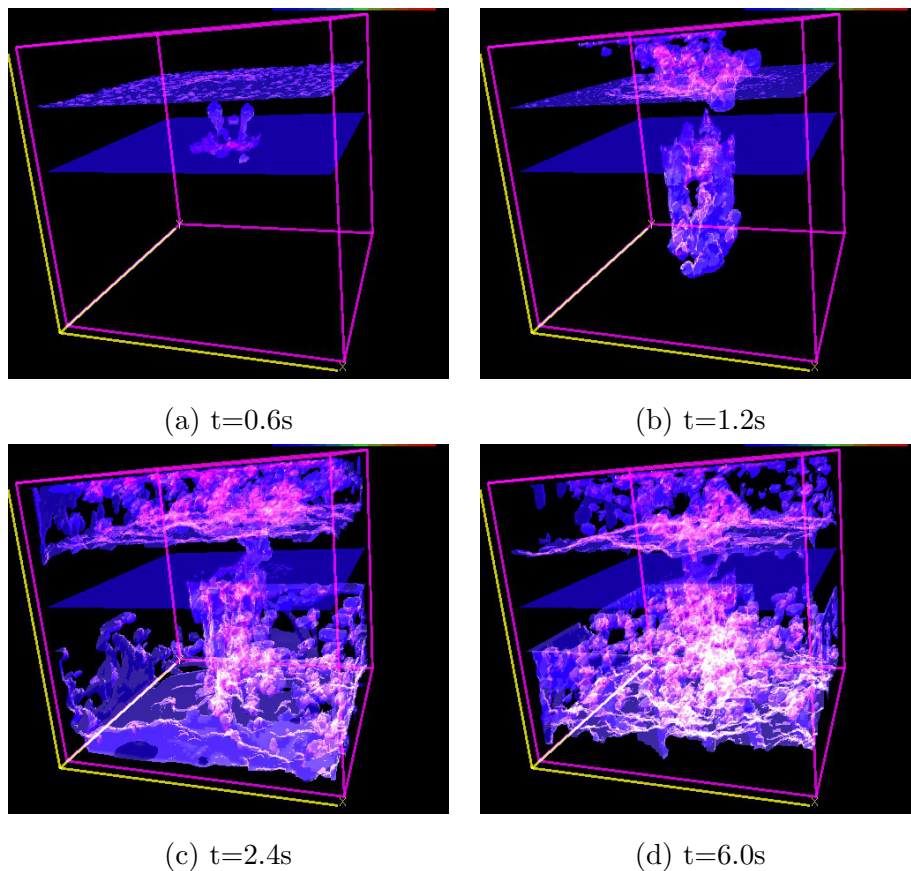


図 5.32: 連結水槽間の流体交換 (識別関数等値面)

### 5.3 章のまとめ

非数値拡散フィルタ (AND フィルタ) および 3 次元 PLIC 法を気液混相流数値計算における識別関数移流計算に適用し、手法の適用性を確かめた。

重力が支配的な外力となる例題による検証計算においては、下流水深を有さない水柱崩壊問題において流体計算法の妥当性を確認した後、より複雑な水面形状を呈する下流水深を有する水柱崩壊問題を対象として検証計算を行い、AND フィルタの効果を確認した。この結果、数値拡散によって流体界面における識別関数勾配が緩くなることを抑制する効果が確認され、得られた流体界面形状も実験画像と比較して同様の傾向のものであることを確認した。初期状態において下流側に配置された水に着色を施し、水中崩壊過程における上下流側の水の運動について既往研究の実験画像と比較し、目視によりその妥当性を確認した。また、AND フィルタを組み込むことによって増加した流体計算時間は全体の 15.6%であった。

スロッシングの気液混相流数値計算例では、AND フィルタの適用によって界面幅が計

算の進行とともに厚くなることを防ぐ効果があることを定性的に確認するとともに水面形状や界面幅に対する定量的な誤差評価を行った。

また、第 4 章にて提案された表面張力評価法をせん断流れ中の液滴変形問題や、液滴落下問題等に適用した。

液滴落下の問題においては、識別関数の移流計算に AND フィルタを用いたケースとともに 3 次元 PLIC を用いたケースについても数値計算を行った。両方のケースにおいて液滴の変形形態については実験結果を概ね支持する結果を得た。

また、せん断流れ中の液滴分裂問題においては、液滴の変形度や分裂の有無などを既往数値計算結果等と比較して手法の妥当性を確かめた。

本論文で提案した表面張力評価手法では界面形状の推定については高精度は望めないため、界面形状に影響を受ける提案手法ではこれ以上の精度を期待することはできない。このため、計算セル内の界面形状推定方法についても高精度化を検討する余地が残されている。特に、移流段階での界面推定では界面の向きを優先し、界面張力評価の段階では界面交差の位置を優先しているため、異なる手法で界面推定を行うこととなっているが、これらの要求を同時に満たす界面推定手法の開発が今後の課題として残されている。

最後に、本論文にて開発した数値計算手法を用いた応用例として、連結水槽内の液体交換の数値計算を行った。この数値計算については、AND フィルタおよび第 3 章で検討した手法による 3 次元 PLIC を用いたケースを検討した。非常に複雑に変形した気液界面を含む数値計算であるが、AND フィルタを用いたケースでは安定して所定時間まで計算を行うことができたが、第 3 章で検討した移流計算方法を用いたケースでは途中で計算が破綻する結果となった。この原因については、移流計算の時間発展の際に方向分離したことが考えられる。

例えば、 $x$  方向の移流計算終了時点で液体領域の一般部の体積占有率が一時的に 1 より小さくなることがある。第 3 章のアルゴリズムに従うと、この次に  $y$  方向の移流計算を行うために液体一般部であっても界面形状を推定し、移流フラックスを求めることとなる。このとき、場合によっては識別関数の非圧縮性を満たさない移流フラックスを計算してしまう可能性がある。このような移流フラックス評価の積み重ねによって識別関数の非圧縮性が満たされなくなり、数値計算の不安定化につながるものと考えられる。

第 3 章の検証問題でこの問題が顕在化しなかった理由としては、流れ場の違いが考えられる。検証問題に用いた流れ場は方向分離の影響が現れないか現れにくい単純な流れ場であったが、連結水槽の数値計算のような複雑な流れ場では方向分離したことによる影響が現れ、数値計算の破綻につながったと考えられる。

## 参考文献

- [1] 牛島省, 山田修三, 藤岡奨, 瀬津家久. 3次元自由水面流れによる物体輸送の数値解法 (3D MICS) の提案と適用性の検討. 土木学会論文集, Vol. 810/II-74, pp. 79–89, 2006.
- [2] 牛島省, 瀬津家久. 陰解法を用いたコロケート格子による高次精度の流体解析手法の提案. 土木学会論文集, No. 719/II-61, pp. 21–30, 2002.
- [3] Hirsh C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley & Sons, 1990.
- [4] Martin J.C. and Moyce W.J. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A*, Vol. 244, pp. 312–324, 1952.
- [5] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 123, pp. 421–434, 1996.
- [6] Imre M. Janosi, Dominique Jan, K. Gabor Szabo, and Tamas Tel. Turbulent drag reduction in dam-break flows. *Experiments in Fluids*, Vol. 37, pp. 219–229, 2004.
- [7] T. Okamoto and M. Kawahara. Two-dimensional sloshing analysis by the arbitrary lagrangian-eulerian finite element methods. *Proceeding of JSCE*, Vol. 441, No. I-18, pp. 39–48, 1992.
- [8] J. Li, Y.Y. Renardy, and M. Renardy. Numerical simulation of breakup of a viscous drop in simple shear flow through a volume-of-fluid method. *Phys. Fluids*, Vol. 12, pp. 269–282, 2000.
- [9] 高田尚樹. Phase-field モデルに基づく二相流数値解析手法の研究. 第 17 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, CD-ROM, B9-4, 2003.
- [10] J.M.Rallison. A numerical study of the deformation and burst of a drop in general shear flows. *J. Fluid Mech.*, Vol. 109, p. 465, 1981.
- [11] S. Kwak, C. Pozrikidis, and R. Skalak. Adaptive triangulation of evolving closed, or open surfaces by the advancing-front method. *J. Comput. Phys.*, Vol. 145, p. 61, 1998.

- [12] M.R.Kennedy, C. Pozirikids, and R. Skalak. Motion and deformation of liquid drops and the rheology of dilute emulsions in simple flow. *Comput. Fluids*, Vol. 23, p. 251, 1994.
- [13] G. Coppola, G. Rocco, and L. Luca. Insights on the impact of a plane drop on a thin liquid film. *Phys. Fluids*, Vol. 23, No. 2, p. 022105, 2011.
- [14] N.Nikolopoulos, A.Theodorakakos, and G.Bergeles. Three-dimensional numerical investigation of a droplet impinging normally onto a wall film. *J.Comput.Phys.*, Vol. 225, pp. 322–341, 2007.
- [15] N. Baumann and Y. Renardy. Vortex rings of one fluid in another in free fall. *Phys. Fluids*, Vol. A4, No. 3, March 1992.
- [16] D. Bhaga and M.E.Weber. Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities. *J.Fluid Mech.*, Vol. 105, pp. 61–85, 1981.
- [17] Jinsong Hua and Jing Lou. Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid. *J.Comput.Phys.*, Vol. 222, pp. 769–795, 2007.
- [18] Y.L.Zhang, K.S.Yeo, B.C.Khoo, and C.Wang. 3D Jet Impact and Torodial Bubbles. *J.Comput.Phys.*, Vol. 166, pp. 336–360, 2001.



## 第6章 結論

本研究では、空気と水が激しく混ざり合うような現象を対象として数値計算を行うことを目標とし、異なる流体領域を安定かつ高精度に捕捉する計算手法について検討した。

界面の大変形を伴う混相流れ数値計算においては、安定かつ高精度に界面捕捉を行う必要があり、数多くの研究がなされてきた。界面捕捉の方法には種々の方法が提案されているが、本研究では体積占有率を基にした識別関数を用いる方法を用いた。上記の手法では、主に移流計算に伴って生じる数値拡散によって識別関数の精度が計算の進行とともに落ちる問題がある。そこで本研究では、第2章、第3章において識別関数の高精度移流計算手法について検討した。その上で、空気と水が激しく混ざり合うような現象では無視できないと考えられる表面張力の評価法について、第4章にて検討し、第5章にてこれらの手法を用いた応用計算例を示した。

第2章においては、識別関数の高精度移流計算手法について検討した。移流計算スキーム自体は既往のスキームを用いるものとし、移流計算で生じた数値拡散を補正する役割をもつ非数値拡散フィルタを提案し、その有効性を1次元、2次元および3次元の検証計算を通して検証した。ANDフィルタはそのアルゴリズム上、以下に示す利点を持ち合わせている。

1. 被移流関数の値を常に0と1の間に保ち、安定した計算が持続可能である。
2. 数値拡散を修正しながら時間発展するため、界面厚さを一定に保つことができる。
3. 被移流関数のみを使用して代数計算により修正値を求めるため、コンパクトなアルゴリズムであり、導入が容易である。

検証計算では、特に高次TVDスキームとANDフィルタの組み合わせによる結果が精度の高い計算結果を与えた。現在、VOF法の移流スキームとして良く用いられるTHINC\WLIC法と比較して、界面の滑らかさにおいて若干劣るものの、同オーダーの精度を得ることができた。また、提案手法の並列計算手法についても検討した。

第3章においては、第2章とは対照的に移流スキーム自体の精度を向上させる方向性で識別関数移流計算の高精度化を検討した。高精度界面捕捉法として3次元PLICを採用し、切断平面と計算セルの位置関係によらず統一的に取り扱うアルゴリズムを提案し、その有効性を基本的なベンチマーク問題を通して確かめた。

計算精度と計算時間の関係については、既往アルゴリズムによる 3 次元 PLIC および THINC\WLIC との比較検討を行い、同一計算セルでは計算精度の点で優位であることを示した。計算時間は THINC\WLIC の 1.5 倍から 3.5 倍程度を要するが、収束性が高いため計算セル数が増える程 THINC\WLIC との計算時間の比は 1 に近づく傾向にある。直接的に体積を求める 3 次元 PLIC と比較すると、計算時間を長く要するものの比較的高い収束性を有するため、計算セル数が増加すると精度の面では優位に立つことを確認した。

第 4 章においては、第 2 章および第 3 章において検討した高精度界面捕捉法の使用を前提とし、高精度に求められた識別関数から界面形状を直接的に推定することによる表面張力評価法を提案した。提案手法では界面形状を直接的に推定し、界面と計算セル体積の交差線を基に表面張力を評価する。CSF モデルのように数セル分の界面領域を積分することによって曲率を求める必要がないため、既往手法と比較してより少ないセル数で、気泡および液滴周りの表面張力を評価できる。

提案手法の基礎的な検証として曲率の再現性および球形液滴の周囲に発生する圧力ジャンプの再現性について数値計算を行い、概ね妥当な結果を得た。

第 5 章においては、本章の提案手法を用いて様々な気液混相流れへの適用結果を示した。

検証計算においては、下流水深を有さない水柱崩壊問題において流体計算法の妥当性を確認した後、より複雑な水面形状を呈する下流水深を有する水柱崩壊問題を対象として検証計算を行い、AND フィルタの効果を確認した。この結果、数値拡散によって流体界面における識別関数勾配が緩くなることを抑制する効果が確認され、得られた流体界面形状も実験画像と比較して同様の傾向のものであることを確認した。

また、AND フィルタを組み込むことによって増加した流体計算時間は全体の 15.6% であった。

スロッシングの気液混相流数値計算例では、AND フィルタの適用によって界面幅が計算の進行とともに厚くなることを防ぐ効果があることを定性的に確認するとともに水面形状や界面幅に対する定量的な誤差評価を行った。

また、第 4 章にて提案された表面張力評価法をせん断流れ中の液滴変形問題や、液滴落下問題等に適用した。

液滴落下の問題においては、識別関数移流計算に AND フィルタを用いた場合、3DPLIC を用いた場合ともに液滴の変形形状について実験結果を概ね支持する結果を得た。また、せん断流れ中の液滴分裂問題においては、液滴の変形度や分裂の有無などを既往数値計算結果等と比較して手法の妥当性を確かめた。

以上に示される様に、本研究では高精度界面捕捉法の開発から始め、高精度に捕捉された識別関数の利用を前提とした界面張力評価法を提案し、これらの手法を用いて気液混相流れ計算を行い、計算手法の妥当性を確認した。

以下に、今後の課題をまとめる。第 2 章においては、並列計算における負荷バランスを考慮したアルゴリズム、アルゴリズムの効率化によるフィルタ処理の高速化および非構造格子への拡張が更なる検討課題として挙げられる。

第 3 章における課題は以下の通りである。提案アルゴリズムは、与えられた平面位置から体積断片の体積を求めるアルゴリズムを利用して収束計算を用いて切断平面を求めるものであるため、初期値として与える切断平面位置が収束性に影響を与える。本手法においては初期値の与え方についても検討したが、体積占有率のみからの初期値の推定には限界があるため、法線ベクトルと体積占有率の双方を利用した更に精度の良い初期値の推定が課題である。

また、計算セル内に 3 種類以上の相が混ざった場合など、計算セル内の界面形状が 1 平面では表現しきれない状態の取り扱いや、隣接計算セル間での界面形状の整合性、界面形状の曲面による表現などが挙げられる。

第 4 章における課題としては、表面張力評価法の高精度化が挙げられる。本研究における提案手法では界面形状の推定が単純な基本形状に基づくものであるため、高精度は望めない。このため、計算セル内の界面形状推定方法についても高精度化を検討する余地が残されている。

特に、移流段階での界面推定では界面の向きを優先し、界面張力評価の段階では界面交差の位置を優先しているため、異なる手法で界面推定を行うこととなっているが、これらの要求を同時に満たす界面推定手法の開発が今後の課題として残されている。

第 5 章における課題としては、以下の点が挙げられる。第 3 章において検討した移流計算手法が一般的な流れ場に適用した場合に識別関数の非圧縮性を満たさなくなることが確認されており、この原因が移流計算の方向分離によるものであると考えられる。このため、計算精度と一般的な流れ場への適用性を満たす移流方程式の時間発展方法について検討の余地がある。また、上昇気泡の数値計算において気泡変形の形状が再現できなかった。これは第 4 章において検討した表面張力評価法の精度に課題があることを示しているものと考えられる。

このように本研究で検討した手法には数多くの課題が残されており、手法の更なる高精度化もその中に含まれているが、近年性能の向上が著しい大型計算機の性能を有効に活用してより詳細で精度の高い数値計算を行うためには、本研究で行ったように数値計算に必要とされる計算セル数を可能な限り少なく抑えることも必要と考えられる。本研究が大規模計算を含む数値シミュレーションによる工学的課題解決のための要素技術として役立つことがあれば幸いである。

## 謝辞

本研究の遂行にあたり、終始一貫して貴重なご指導とご助言を賜りました京都大学学術情報メディアセンター牛島省教授に深甚な謝意を表します。大変ご多忙の中、本論文の副査をお引き受け頂きました京都大学大学院工学研究科・都市社会工学専攻細田尚教授に感謝いたします。本論文の草稿をご覧頂き、また折に触れ適切な御指摘・御提案頂きました京都大学防災研究所米山望准教授に謹んで感謝の意を表します。また、並列計算プログラムの技術的な面について数多く議論させて頂くとともにいつも気を遣って頂いた京都大学大学院修士課程山下遼君（現、日立造船株式会社）をはじめ、計算工学研究室の皆様へ深く感謝申し上げます。さらに、本研究の遂行にあたり職場へ大変ご迷惑をおかけしているにも関わらず温かく見守り続けて頂いた独立行政法人水資源機構総合技術センター、独立行政法人土木研究所水災害・リスクマネジメント国際センターの皆様には衷心より感謝申し上げます。最後に、本研究遂行の間、多大なる負担にも関わらず常に著者を支えて頂いた家族に心より感謝申し上げます。

## 付 録 A 階段関数の移流計算に伴う数値拡散について

本付録では、1次元非圧縮流れ場における階段関数の移流計算に伴う数値拡散と修正量について述べる。1次元非圧縮流れ場における移流方程式は式(2.1)に示されるが、以下に再掲する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.1})$$

ただし、非圧縮の条件により  $u$  は定数である。また、被移流関数  $\phi$  は階段関数  $H(x_h)$  とする。このとき移流方程式の理論解は容易に得られ、次式となる。

$$\phi = H(x_h - ut) \quad (\text{A.2})$$

一方で、移流方程式を離散化して数值的に解く場合を考える。移流方程式を有限体積法で離散化し、 $n$  ステップ目の計算セル  $i$  における被移流関数のセル平均値を  $\bar{\phi}_i^n$ 、計算セル境界におけるフラックスを  $q_i^n$ 、時間刻みを  $\Delta t$ 、セル幅を  $\Delta x$  とすると次式のように離散化できる。

$$\bar{\phi}_i^{n+1} = \bar{\phi}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} \quad (\text{A.3})$$

これらから1次元移流方程式の理論解と数値解の差異である  $\Delta\phi_i$  が次式の通り得られる。

$$\begin{aligned} \Delta\phi_i^{n+1} &= \hat{\phi}_i^{n+1} - \bar{\phi}_i^{n+1} = \frac{\int_{L_i} H(x_h^n - ut) - H(x_h^n) dx}{\Delta x} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} \\ &= \Phi_i^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

本付録においては、 $\Delta\phi_i = 0$  を満たすための数値誤差フラックス導出の詳細を示す。

第2章と同様、階段関数の不連続点  $x_h$  の位置が  $n$  ステップ目と  $n+1$  ステップ目の間でセル境界を通過しない場合 (以下、ケース A) と通過する場合 (以下、ケース B) の2通りに分けて考える。

まず、不連続点の位置  $x_h$  がセル境界を通過しない場合 (ケース A) においては、不連続面を有するセル番号を  $i$  とすると  $x_i < x_h < x_h + u\Delta t < x_{i+1}$  が成り立つ。このとき、式(2.10)は式(A.5)となる。

$$\Delta\phi_i^{n+1} = \hat{\phi}_i^{n+1} - \bar{\phi}_i^{n+1} = -\frac{u\Delta t}{\Delta x} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \{q_{i+1}^n - q_i^n\} = \frac{\Delta t}{\Delta x} \{-u + q_{i+1}^n - q_i^n\} \quad (\text{A.5})$$

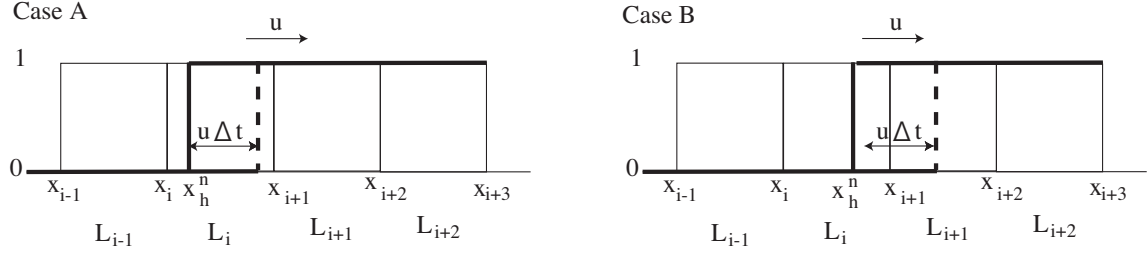


図 1.1: 階段関数の 1 次元移流計算における場合分け

理論解  $\hat{\phi}_i^{n+1}$  と数値解  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  が一致する条件は  $\Delta\phi_i = 0$  であるため、条件式 (A.6) が得られる。

$$\phi_{i+1}^{*,n} - \phi_i^{*,n} = 1 \quad (\text{A.6})$$

ただし、1 次元移流方程式に課された非圧縮条件を利用して計算領域全体で流速  $u$  が一定とし、 $\phi_i^{*,n} = q_i^n / u$  とした。従って、ある移流スキームによって得られたセル境界における  $\phi_i^{*,n}$  が関係式 (A.6) を満たしていれば、得られた数値解は理論解と一致していることが分かる。

次に、不連続面を有するセルの両隣のセルについて同様に理論解と数値解の差を調べる。

$$\Delta\phi_{i-1}^{n+1} = \hat{\phi}_{i-1}^{n+1} - \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} = c\{\phi_i^{*,n} - \phi_{i-1}^{*,n}\} \quad (\text{A.7})$$

$$\Delta\phi_{i+1}^{n+1} = \hat{\phi}_{i+1}^{n+1} - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} = c\{\phi_{i+2}^{*,n} - \phi_{i+1}^{*,n}\} \quad (\text{A.8})$$

ただし、クーラン数を  $c$  とした。セル境界  $i-1$  は  $n$  ステップの段階において境界を共有する計算セルの関数値が 0 であるため、移流スキームによる内挿値  $\phi_{i-1}^{*,n}$  は 0 であることが合理的である。セル境界  $i$  は  $n$  ステップの段階において境界を共有する計算セルのスカラー平均値が 0 と 0 より大きな値である。minmod 関数による勾配制限を用いる TVD スキーム [1, 2] や、風上差分法では、このような場合においてもセル境界  $i$  のスカラー値は 0 と求められるが、0 でない内挿値を与える移流スキームであれば、 $i-1$  番目のセルの誤差は  $\Delta\phi_{i-1}^{n+1} = c\phi_i^{*,n}$  にて得られる。セル境界  $i+1$  についても同様に考えることが可能で、移流スキームによる内挿値  $\phi_{i+2}^{*,n}$  が 1 であると仮定する。セル境界  $i+1$  は  $n$  ステップの段階において境界を共有する計算セルのスカラー平均値が 1 と 1 より小さな値である。セル境界  $i+1$  のスカラー値は 1 でない内挿値を与える移流スキームであれば、 $i+1$  番目のセルの誤差は、 $\Delta\phi_{i+1}^{n+1} = c(1 - \phi_{i+1}^{*,n})$  となる。 $\phi_{i-1}^{*,n} = 0, \phi_{i+2}^{*,n} = 1$  の仮定のもと、各計算セ

ルにおける誤差をまとめると、式 (A.9-A.11) が得られる.

$$\Delta\phi_{i-1}^{n+1} = -\bar{\phi}_{i-1}^{n+1} = c\phi_i^{*,n} \quad (\text{A.9})$$

$$\Delta\phi_i^{n+1} = \hat{\phi}_i^{n+1} - \bar{\phi}_i^{n+1} = c(-1 + \phi_{i+1}^{*,n} - \phi_i^{*,n}) = \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} - (1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1}) \quad (\text{A.10})$$

$$\Delta\phi_{i+1}^{n+1} = 1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} = c(1 - \phi_{i+1}^{*,n}) \quad (\text{A.11})$$

理論解への修正量  $\Delta\phi$  が数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  を用いて表現されているので、一旦  $n+1$  ステップ目の数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  を求めた後、数値解から理論解への修正が可能である.  $i$  から  $i+1$  番目の計算セルへの数値誤差修正量を  $\bar{q}_{i+1}$  とし、修正後のスカラーを  $\phi_{c,i}^{n+1}$  とすると、式 (A.9-A.11) は以下の通り、保存系の移流方程式に書き直せる.

$$\phi_{c,i}^{n+1} = \bar{\phi}_i^{n+1} + \Delta\phi_i^{n+1} = \bar{\phi}_i^{n+1} - (\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) \quad (\text{A.12})$$

ただし、式の対応により  $\bar{q}_i$  は次式に示される.

$$\begin{aligned} \bar{q}_{i-1} &= 0 \\ \bar{q}_i &= \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \\ \bar{q}_{i+1} &= 1 - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} \\ \bar{q}_{i+2} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

以上により、数値誤差の修正は式 (A.12) による保存系の移流方程式によって可能であり、誤差フラックス  $\bar{q}_i$  が数値解  $\bar{\phi}_i^{n+1}$  を用いて表される.

次に、不連続点の位置  $x_h$  がセル境界を通過する場合 (ケース B) について考える. ケース B においては、 $n$  ステップあるいは  $n+1$  ステップにおいて不連続点を含む計算セルと隣接するセルも含めて計 4 セルについて考察する.

まず、 $n$  ステップあるいは  $n+1$  ステップにおいて不連続点を含む計算セルを  $i$  および  $i+1$  とすると、式 (A.12) は式 (A.16-A.17) となる.

$$\Delta\phi_{i-1}^{n+1} = \hat{\phi}_{i-1}^{n+1} - \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} = c(\phi_i^{*,n} - \phi_{i-1}^{*,n}) \quad (\text{A.14})$$

$$\Delta\phi_i^{n+1} = \hat{\phi}_i^{n+1} - \bar{\phi}_i^{n+1} = \frac{x_h^n - x_{i+1}}{\Delta x} + c(\phi_{i+1}^{*,n} - \phi_i^{*,n}) \quad (\text{A.15})$$

$$\Delta\phi_{i+1}^{n+1} = \hat{\phi}_{i+1}^{n+1} - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} = \frac{x_{i+1} - x_h^n}{\Delta x} + c(-1 + \phi_{i+2}^{*,n} - \phi_{i+1}^{*,n}) \quad (\text{A.16})$$

$$\Delta\phi_{i+2}^{n+1} = \hat{\phi}_{i+2}^{n+1} - \bar{\phi}_{i+2}^{n+1} = c(\phi_{i+2}^{*,n} - \phi_{i+3}^{*,n}) \quad (\text{A.17})$$

隣り合うセルの値  $\bar{\phi}$  が同じ場合はセル境界の値も同じ値に内挿されたと仮定すれば、 $\phi_{i+2}^{*,n} = 1, \phi_{i-1}^{*,n} = 0$  となる. また、理論解から  $\hat{\phi}_{i-1} = 0, \hat{\phi}_i = 0, \hat{\phi}_{i+2} = 1$  を代入すると、以下の

式が得られる.

$$\Delta\phi_{i-1}^{n+1} = -\bar{\phi}_{i-1}^{n+1} = c\phi_i^{*,n} \quad (\text{A.18})$$

$$\Delta\phi_i^{n+1} = -\bar{\phi}_i^{n+1} = \frac{x_h^n - x_{i+1}}{\Delta x} + c(\phi_{i+1}^{*,n} - \phi_i^{*,n}) \quad (\text{A.19})$$

$$\Delta\phi_{i+1}^{n+1} = \hat{\phi}_{i+1}^{n+1} - \bar{\phi}_{i+1}^{n+1} = \frac{x_{i+1} - x_h^n}{\Delta x} + c(-1 + \phi_{i+2}^{*,n} - \phi_{i+1}^{*,n}) = \bar{\phi}_i^{n+1} + \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \quad (\text{A.20})$$

$$\Delta\phi_{i+2}^{n+1} = 1 - \bar{\phi}_{i+2}^{n+1} = c(1 - \phi_{i+2}^{*,n}) = 0 \quad (\text{A.21})$$

この場合においても理論解への修正量  $\Delta\phi$  が数値解  $\bar{\phi}^{n+1}$  を用いて表現されているため、一旦数値解を求めた上で数値解から理論解への修正が可能である.

$i$  から  $i+1$  番目の計算セルへの数値誤差修正量を  $\bar{q}_{i+1}$  を用いて式 (A.18-A.21) を、式 (A.12) の形に書き直すことが出来る.

ただし、式の対応により  $\bar{q}_i$  は次式に示される.

$$\begin{aligned} \bar{q}_{i-1} &= 0 \\ \bar{q}_i &= \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \\ \bar{q}_{i+1} &= \bar{\phi}_i^{n+1} + \bar{\phi}_{i-1}^{n+1} \\ \bar{q}_{i+2} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

まとめると、式 (A.9-A.11) および式 (A.18-A.21) に示される数値誤差の修正は、式 (A.12) によって表される保存系の移流方程式に従う. ステップ関数の 1 次元移流方程式の場合にはフラックスを理論解と数値解の差から得ることが出来るため、式 (A.12) を用いて  $n+1$  ステップ目の数値解から理論解へ修正することが可能である.

## 参考文献

- [1] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, Vol. 49, No. 3, pp. 357–393, 1983.
- [2] Hirsh C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley & Sons, 1990.